

Thermischer und elektrischer Transport in hybriden Heterostrukturen

**Von der Fakultät für Mathematik, Naturwissenschaften und
Informatik der Brandenburgischen Technischen Universität
Cottbus-Senftenberg**

zur Erlangung des akademischen Grades

**Doktor der Naturwissenschaften
(Dr. rer. nat.)**

genehmigte Dissertation

vorgelegt von

Dipl.-Physiker

Mathias Käso

geboren am 25.10.1980 in Cottbus

Gutachter: Prof. Dr. rer. nat. habil. Götz Seibold

Gutachter: Prof. Dr. rer. nat. habil. Tilmann Kuhn

Gutachter: Honorarprof. Dr. sc. tech. Dr.-Ing. Hans Richter

Tag der mündlichen Prüfung: 01.02.2016

An extremen Punkten ist die Welt bemerkenswert einfach.

Für
Manuela, Lena und Anna

Kurzfassung

Im ersten Teil untersuchen wir den phononischen Wärmetransport in nanoskaligen, heterogenen Strukturen. Mit Hilfe des Nichtgleichgewicht-Green-Funktionen-Formalismus leiten wir eine Entwicklung der phononischen Stromtransmission für kleine Frequenzen her. Diese besitzt Gültigkeit für eine beliebige Oszillatorkette, welche eine typische Kontakt-Device-Kontakt-Struktur aufweist. Wir nutzen die gefundene Entwicklung in der Landauer Darstellung der Wärmeleitfähigkeit, wodurch wir eine systematische Tieftemperaturentwicklung bestimmen können. Betrachtet man diese Entwicklung bis zur zweiten Ordnung, erscheint die quantisierte Wärmeleitfähigkeit als ein konstantes Plateau, in der Darstellung der Wärmeleitfähigkeit geteilt durch die Temperatur. Dies gilt für die von uns untersuchten Kontakt-Device-Kontakt-Systeme, welche vollständig heterogen sein können, insofern das Produkt aus Kopplungskonstante und Oszillatormasse in beiden Kontakten identisch ist. Dabei ist das Ergebnis vollkommen unabhängig vom Streugebiet. Im Anschluss an das Plateau gewinnen die höheren Ordnungen der Tieftemperaturentwicklung an Bedeutung und führen zu endlichen Temperaturkorrekturen, die einem kubischen Potenzgesetz gehorchen. Dieses Verhalten hängt von den strukturellen Details des Streugebiets ab und ist in Übereinstimmung mit dem Experiment und numerischen Berechnungen. Als Anwendung unserer allgemeinen Ergebnisse betrachten wir eine “Double Junction”-Kette und finden als erstes Phänomen nach unserer Tieftemperaturentwicklung ein zweites Plateau. Dieses Plateau steht in Verbindung mit einer phasengemittelten Phononentransmission, welche für steigende Temperaturen zu einer Unabhängigkeit der Wärmeleitfähigkeit von der Device-Länge führt. Im weiteren Verlauf dieser Arbeit werden diese Ergebnisse auf quasi-eindimensionale 3D-Systeme in der Kontakt-Device-Kontakt-Struktur verallgemeinert. Dazu werden exemplarisch geeignete Kristallstrukturen identifiziert und anschließend für langwellige Phononen mathematisch analysiert. Für Temperaturen unterhalb eines kritischen Wertes T_K sind die Ergebnisse des eindimensionalen Falls auf jede der akustischen Moden übertragbar. Daraus resultiert eine analoge Beschreibung und Diskussion des Tieftemperaturverhaltens der Wärmelei-

tung, wie wir sie im strikt eindimensionalen Fall vorfinden.

Im zweiten Teil betrachten wir ein thermisches Modell integrierter Schaltkreise, unter Berücksichtigung der zugehörigen Chip-Umgebung. Als die einfachste Wahl, behandeln wir die aktive Schicht (“Front End Of Line”) als ein Feld, bestehend aus identischen Quantenbauelementen mit der gleichen, von der Zeit abhängigen mittleren Temperatur. Um die Chip-Umgebung zu modellieren, setzen wir voraus, dass sich die aktive Schicht zwischen zwei planparallelen Wärmereservoirs befindet. Das obere Reservoir stellt dabei die Verdrahtungsschicht des Chips dar (“Back End Of Line”). Die Temperatur dieser Schicht ist weitestgehend durch die in den Leitern dissipierte joulesche Wärme bestimmt und ist typischerweise in der Größenordnung von hundert Grad Celsius. Das untere Reservoir verkörpert die Kühleinheit, die sich ungefähr auf Raumtemperatur befindet. Wir lösen die gekoppelten Gleichungen, die auf der einen Seite den Wärmetransport zwischen der aktiven Schicht und den umgebenden Wärmereservoirs und auf der anderen Seite den elektrischen Transport im Quantenbauelement beschreiben. Daraus ergeben sich die Arbeitstemperaturen der betrachteten Quantenbauelemente, welche Lösungen eines Fixpunktproblems sind. Diese Temperaturen hängen von der Position der aktiven Schicht zwischen den beiden Wärmereservoirs ab. Die Stabilität der Fixpunkte lässt sich aus einer geeigneten Linearisierung der zeitabhängigen Gesamtlösung ableiten. Für ausgewählte Parameter und eine aktive Schicht aus identischen Nanotransistoren werden numerische Lösungen präsentiert.

Abstract

In the first part, we study phononic heat transport in nanoscale devices. In the non-equilibrium Green's function formalism an analytical small-frequency expansion of the phonon current transmission is derived for an arbitrary oscillator chain with typical contact-device-contact structure. Applying this expansion in a Landauer formula it is possible to construct a systematic low-temperature expansion of the thermal conductance. It follows that quantized thermal conductance occurs as a plateau of the thermal conductance divided by the temperature within second order of the temperature expansion for completely heterogeneous systems as long as the product of force constant and oscillator mass is identical in both contacts, independent of the scattering area. Beyond these plateau the higher order terms of the low-temperature expansion yield a finite-temperature correction exhibiting the form of a cubic power law depending on the details of the scattering area. These findings are in agreement with experiments and numerical calculations. Our general results are applied to a double junction chain, where we find as the first phenomenon beyond our low-temperature expansion a second plateau. This plateau is associated with a thermal phase-averaging of the phonon transmission, which leads for increasing temperatures to an independence of the thermal conductance from the device length. Subsequently, we generalise these results on quasi-one dimensional 3D-systems with the contact-device-contact shape. For this purpose, we identify exemplarily suitable crystal structures, which we analyze mathematically for the long-wave phonons. For temperatures below a critical value T_K the relevant results of the one dimensional case are valid for each acoustic mode. This lead to an analog description and discussion of the low-temperatures behaviour of the thermal conduction as in the strict one dimensional case.

In the second part, we consider a thermal model for an integrated circuit including its chip environment. As the simplest choice, the active device layer ("Front End Of Line") consists of an array of replicas of the same quantum device with the same time depended average temperature. Modeling the chip environment we assume this active layer is

sandwiched between two coplanar heat reservoirs. The top heat reservoir represents the wiring layer of the chip (“Back End Of Line”). Its temperature is predominantly determined by the dissipated Joule heat in the wiring, typically in the order of one hundred degrees of Celsius. The bottom reservoir represents the cooling unit at about room-temperature. We solve the coupled equations describing thermal transport between the active layer and surrounding heat reservoirs and electrical transport in the quantum devices. The stationary working temperatures of the considered quantum devices can be found from a fix-point problem. These temperatures depend on the position of the active layer between the both heat reservoirs. A proper linearization of the complete time-depended problem yields the stability of these fix-points. Numerical solutions for a device layer consisting of identical nano-transistors are given for selected parameters.

Inhaltsverzeichnis

Abbildungsverzeichnis	IX
Tabellenverzeichnis	XV
Abkürzungsverzeichnis	XVII
Einführende Worte	1
I. Quantisierung der phononischen Wärmeleitfähigkeit in Nano-heterostrukturen bei tiefen Temperaturen	5
1. Einleitung I	7
2. Nichtgleichgewichts-Green-Funktionen-Formalismus für Phononen	11
2.1. Gitterschwingungen in nanoskaligen Heterostrukturen	11
2.2. Quantisierte Gitterschwingungen: Phononen	14
2.3. Der NEGF-Formalismus	17
2.3.1. Greenscher Formalismus	17
2.3.2. NEGF-Formalismus für Phononen	18
2.4. Phononischer Wärmetransport	20
3. Quantisierte Wärmeleitung in eindimensionalen Strukturen	23
3.1. Eindimensionale Stromtransmission	23
3.2. Stromtransmission und Einteilchen-Phononentransmission	27
3.3. Tieftemperaturentwicklung der Wärmeleitfähigkeit	28
3.4. Quantisierte Wärmeleitfähigkeit	29
3.4.1. Das homogene Kontakt-Device-Kontakt-System	30
3.4.2. Das heterogene Kontakt-Device-Kontakt-System	34

3.5. Anwendung auf ein eindimensionales Drei-Komponenten-System	37
4. Quantisierte Wärmeleitung in dreidimensionalen Strukturen	45
4.1. Effektive Kristallstruktur für akustische Phononen	45
4.2. Dynamik des effektiven Kristalls und die quantisierte Wärmeleitfähigkeit	49
4.3. Interpretation und Vergleich der Ergebnisse mit dem Experiment	59
4.4. Effektive Kopplungen	61
4.5. Anwendung auf ein Aluminiumarsenid-Galliumarsenid-System	63
5. Zusammenfassung I	71
 II. Thermische Eigenschaften integrierter Quantenbauelemente eingebettet in ihre Chipumgebung	 73
6. Einleitung II	75
7. Das grundlegende thermische Modell	77
7.1. Modellierung der thermischen Umgebung	77
7.2. Wärmeleitproblem	80
7.3. Lösung des Wärmeleitproblems	81
7.4. Stationäre Lösung des inhomogenen Problems	84
8. Stabilitätsuntersuchung der Fixpunkte	89
8.1. Linearisierung der Temperaturlösung	89
8.2. Stabilitätsuntersuchung	90
9. Das Quantenbauelement als ein Nanotransistor	97
9.1. Der Nanotransistor	97
9.2. Das Standard-Fixpunktproblem für einen Nanotransistor	101
10. Zusammenfassung II	105
A. Ergänzende Berechnungen I	107
A.1. Greensche Matrix im eindimensionalen System	107
A.2. Stromtransmission für kleine Frequenzen	109

A.3. Taylorentwicklung von Gleichung (3.33)	113
A.4. Asymptotische Entwicklung von Gleichung (3.33)	114
A.5. Stromtransmission für eine atomare “Double-Junction” Kette	115
A.6. Die Transversalmoden	116
A.7. Die kritische Temperatur T_K	117
B. Ergänzende Berechnungen II	119
B.1. Verifikation der Lösung des Wärmeleitproblems	119
B.2. Methode der partiellen Integration	120
B.3. Analyse von $\tau(t)$	122
B.4. Numerische Berechnung der Stromtransmission für Elektronen	123
Literaturverzeichnis	127
Danksagung	137

Abbildungsverzeichnis

2.1.	Schematische Darstellung einer typischen KDK-Struktur. Gezeigt sind außerdem die Atomgruppen LKB, LK, LD, D, RD, RK und RKB, welche sich aufgrund ihrer Lage im Systemgefüge in ihren dynamischen Eigenschaften unterscheiden. Die Atome in den Gruppen LD, D und RD bilden im Allgemeinen die Heterostruktur.	12
2.2.	$\eta(\omega, T)$ als Funktion der Frequenz ω für verschiedene Temperaturen T . Geht $T \rightarrow \infty$, strebt $\eta(\omega, T)$ für alle ω gegen die Konstante $k_B/2\pi$	21
3.1.	Schematische Darstellung einer eindimensionalen KDK-Struktur, bestehend aus einem beliebig gearteten Streubereich (Device), welcher an zwei homogene, nicht unbedingt identische Kontakte gekoppelt ist. Anders als der Einfachheit halber dargestellt, können die Kontakte auch aus einer EZ mit mehr als einem Atom in der Basis bestehen.	24
3.2.	Normierte thermische Leitfähigkeit $\lambda_h(\beta)$ für eine homogene Atomkette (durchgezogen) und die zugehörigen Näherungen $\lambda_h^\infty(\beta)$ (gestrichelt) und $\lambda_h^0(\beta)$ (gestrichpunktet). Ein charakteristischer Wechsel im Verhalten der Wärmeleitfähigkeit findet sich bei $\beta = 1/2$	32
3.3.	Transmissionen in einem SJ-System, bestehend aus Si und Ge nach der NEGF-Theorie (durchgezogene Linie) und nach der AMM-Theorie (gestrichelte Linie). Für kleine Frequenzen streben beide Funktionen gegen Ξ_0 . Parametrierung der Massen und Kopplungskonstanten nach [34]. . . .	35
3.4.	Stromtransmission nach Gl. (3.42) für eine Si-Ge-Si _X DJ-Struktur mit $N = 5$. Links: $M_X = M_{Si}$ (durchgezogen), $M_X = (2/3)M_{Si}$ (gestrichelt) und $M_X = (1/3)M_{Si}$ (gepunktet). Rechts: $M_X = M_{Si}$ (durchgezogen), $M_X = 2M_{Si}$ (gestrichelt) und $M_X = 3M_{Si}$ (gepunktet).	38

- 3.5. Stromtransmission nach Gl. (3.42) für eine Ge-Si-Ge_X DJ-Struktur mit $N = 5$. Links: $M_X = M_{Ge}$ (durchgezogen), $M_X = (2/3)M_{Ge}$ (gestrichelt) und $M_X = (1/3)M_{Ge}$ (gepunktet). Rechts: $M_X = M_{Ge}$ (durchgezogen), $M_X = 2M_{Ge}$ (gestrichelt) und $M_X = 3M_{Ge}$ (gepunktet). 38
- 3.6. Darstellung von $\Xi(\omega \rightarrow 0) = \Xi_0$, als Funktion des Verhältnisses der Kontaktmassen $y = M_X/M_{C1}$. Punkte: Für eine Si-Ge-Si_X-Struktur mit einer Device-Region, bestehend aus fünf Ge-Atomen und einem Si-Kontakt. Kreise: Für eine Ge-Si-Ge_X-Struktur mit einer Device-Region, bestehend aus fünf Si-Atomen und einem Ge-Kontakt. Die Punkte und die Kreise sind nach (3.42) und die durchgezogene Linie nach dem universellen Resultat (3.12) berechnet. 39
- 3.7. Transmission für eine Si-Ge-Si DJ-Struktur mit einer Device-Region, bestehend aus fünf Ge-Atomen (durchgezogen) sowie die gemittelte Transmission nach Gl. (3.44) (durchgezogene Linie mit Punkten). Die Peaks resultieren aus multiplen Reflexionen zwischen den zwei Grenzflächen des DJ-Systems. Die Minima der Transmission sind eingehüllt durch das Quadrat der gemittelten Transmissionsfunktion (gepunktet). Der Pfeil markiert die maximale Device-Frequenz $2\tilde{\omega}_0 = 21,4$ THz. In dem "verbotenen" grauen Bereich über $2\tilde{\omega}_0$ beobachten wir Phononentunneln, erkennbar als der kleine Schwanz in der Transmission. 40
- 3.8. Wärmeleitfähigkeit $\Lambda(T)$ geteilt durch T für eine Si-Ge-Si DJ-Struktur mit einer Device-Region, bestehend aus 5 (durchgezogen), 10 (gestrichpunktet), 25 (gestrichelt) und 50 (lang gestrichelt) Ge-Atomen. Das obere Plateau repräsentiert die QWL. Darüber hinaus sehen wir die Entstehung eines zweiten Plateaus für wachsendes N mit dem Wert (3.45). Die gepunktete Linie stellt die Entwicklung nach Gl. (3.24) für ein Device aus fünf Atomen dar. Der Pfeil markiert die Plateauweite $T_\epsilon = 1,6$ K für $\epsilon = 0,01$. Alle Kurven für die verschiedenen N vereinigen sich in einer Asymptote (durchgezogene Linie mit Punkten), die durch $\Lambda_{av}(T)/T$ gegeben ist. 41
- 3.9. Die Plateauweite T_ϵ der Si-Ge-Si DJ-Struktur in Abb. 3.8, als Funktion der Device-Länge N . Wir haben $\epsilon = 0,01$ gewählt, entsprechend einer maximal einprozentigen Abweichung der Wärmeleitfähigkeit vom Quantenwert. 42

- 4.1. Schematische Darstellung eines Kristalls und seiner EZ, welcher sich aufgrund der speziellen Eigenschaften der langwelligen Phononen in einen effektiven Kristall transformieren lässt. 46
- 4.2. Schematische Darstellung eines dreidimensionalen Kristalls im Rahmen des Kontinuumslimes. Die Kugeln symbolisieren die im Schwerpunkt vereinigten Massen der Atome in einer EZ. Sie wechselwirken über effektive Kopplungen, wobei auf die Darstellung der lateralen Kopplungen der Übersichtlichkeit halber verzichtet wurde. Das Device besteht aus einer epitaktischen Schichtung beliebiger Atome und ist an homogene, nicht unbedingt identische Kontakte gekoppelt. 47
- 4.3. Schematische Darstellung der Kopplungsverhältnisse im orthorhombischen Kristall. Die Kugeln symbolisieren die im Schwerpunkt vereinigten Massen der Atome in einer EZ, welche über die effektiven Kopplungen f_l^j , f_{lm}^j und f_{ln}^j wechselwirken. 50
- 4.4. Werte der dimensionslosen Funktion $\kappa(x_G)$ für ganzzahlige $x_G = \hbar\omega_G/k_B T$. Zusätzlich sind als gestrichpunktete Linien die Niveaus 0,01 und 0,001 eingezeichnet, die für ungefähr $x_G = 6$ bzw. $x_G = 9$ erreicht werden. . . . 56
- 4.5. Schematische Darstellung der Wärmeleitfähigkeit $\Lambda(T)$, geteilt durch die Temperatur T in Einheiten von $16\pi^2 k_B^2/3h$ in Anlehnung an Ref. [37]. Gezeigt sind die verschiedenen Transportregime der Wärmeleitfähigkeit, deren theoretischer Verlauf innerhalb eines jeden Regimes durch die gepunktete, die gestrichelte und die gestrichpunktete Linie angedeutet ist. Detaillierte Erklärungen sind im Text zu finden. 60
- 4.6. Schematische Darstellung verschiedener KDK-Systeme aus AlAs (grau) und GaAs (weiß) mit quadratischer Querschnittsfläche ($L_y = L_z$). Als Device fungiert jeweils eine Doppelbarriere aus epitaktisch gewachsenen Schichten der selben Materialien. 63
- 4.7. Schematische Darstellung der nicht primitiven, kubischen EZ der Zinkblendestruktur von AlAs und GaAs. Die grauen Kugeln symbolisieren hier die As-Atome und die weißen Kugeln stehen, je nach Material, für die Al-Atome (AlAs) bzw. Ga-Atome (GaAs). Ebenfalls gezeigt ist die Transportrichtung x , die mit der [100]-Richtung zusammenfällt sowie die zwei lateralen Richtungen $y \leftrightarrow [010]$ und $z \leftrightarrow [001]$ 64

- 4.8. Verlauf der Stromtransmission $\Xi(\omega)$, als Funktion der Frequenz ω für das KDK-System A aus Abb. 4.6 mit zwei identischen AlAs-Kontakten. Im linken Teilbild ist die Transmission der longitudinalen Mode gezeigt, die gegenüber der Transmission der zweifach entarteten Transversalmoden (rechts) eine deutlich höhere “cut off”-Frequenz aufweist. Der Grund hierfür ist die stärkere Kopplung der Atome für die longitudinale Wellenausbreitung. 66
- 4.9. Verlauf der Stromtransmission $\Xi(\omega)$, als Funktion der Frequenz ω für das KDK-System B aus Abb. 4.6 mit zwei identischen GaAs-Kontakten. Im linken Teilbild ist die Transmission der longitudinalen Mode gezeigt, die gegenüber der Transmission der zweifach entarteten Transversalmoden (rechts) eine deutlich höhere “cut off”-Frequenz aufweist. Der Grund hierfür ist die stärkere Kopplung der Atome für die longitudinale Wellenausbreitung. 67
- 4.10. Verlauf der Stromtransmission $\Xi(\omega)$, als Funktion der Frequenz ω für das KDK-System C aus Abb. 4.6 mit einem Kontakt aus AlAs und einem aus GaAs. Im linken Teilbild ist die Transmission der longitudinalen Mode gezeigt, die gegenüber der Transmission der zweifach entarteten Transversalmoden (rechts) eine deutlich höhere “cut off”-Frequenz aufweist. Der Grund hierfür ist die stärkere Kopplung der Atome für die longitudinale Wellenausbreitung. Bestimmt wird hier die “cut off”-Frequenz durch die Eigenschaften von GaAs, da dieses Material die kleineren Maximalfrequenzen Ω_j aufweist. Zusätzlich ist in den kleineren Teilbildern jeweils die Transmission für kleine Frequenzen dargestellt. Erwartungsgemäß konvergieren sie nach (4.23) nicht gegen Eins für $\omega \rightarrow 0$ 68
- 4.11. Verlauf der Gesamtstromtransmission $\Xi(\omega)$ der drei akustischen Moden, als Funktion der Frequenz ω für die KDK-Systeme A, B und C aus Abb. 4.6. Darüber hinaus ist im rechten, unteren Teilbild das Verhalten von $\Lambda(T)/T$ nach Gl. (4.24) für die drei Systeme A (durchgezogen), B (gestrichpunktet) und C (gestrichelt) dargestellt. Ebenfalls zu sehen sind die Temperaturen T_c (schwarze Punkte) sowie die kritische Temperatur T_K (gepunktete Linie). Nähere Erläuterungen sind im Text zu finden. . . 69

- 6.1. Stark vereinfachte Darstellung einer Chipgeometrie, die sich in drei wesentliche Bereiche einteilen lässt. Rot: Die Leitungsschicht, bestehend aus einer Vielzahl an elektrischen Leitungen. Gelb: Die innere Chipstruktur, welche eine aktive Zone beinhaltet, die durch Milliarden von Transistoren gebildet wird. Blau: Die Kühlungsschicht, die üblicherweise an ein Kühlsystem gekoppelt ist und als Wärmesenke fungiert. 76
- 7.1. Stark idealisierte Darstellung der Chipstruktur, die an eine Kühleinheit (Wärmereservoir) gekoppelt ist. Im Zentrum sehen wir ein Feld identischer und homogen verteilter QB sowie die darüber liegende Verdrahtungsschicht, die ein zweites Wärmereservoir darstellt. Nähere Erläuterungen sind im Text zu finden. 78
- 7.2. Normiertes Temperaturprofil $\vartheta(\chi)$, als Funktion des normierten Ortes χ für verschiedene, normierte Temperaturdifferenzen der Reservoirs: $\vartheta_2 = 0$ (durchgezogen), $\vartheta_2 = 1,5$ (gestrichelt) und $\vartheta_2 = 3$ (gestrichpunktet). Die Wärmequelle (FEOL) befindet sich exakt in der Mitte des Systems bei $\delta = 1/2$. Die Temperatur $\Theta = \vartheta(\delta)$ der QB nimmt mit wachsendem Temperaturunterschied ϑ_2 zu. Ist $Q(T) = 0$, zeigt das System jeweils ein einfaches lineares Temperaturprofil. 86
- 7.3. Normierte QB-Temperatur $\Theta(\vartheta_2)$ für verschiedene normierte Quellorte (FEOL): $\delta = 0,1$ (durchgezogen), $\delta = 0,3$ (gestrichelt) und $\delta = 0,6$ (gestrichpunktet). Im grundsätzlich linearen Verhalten von $\Theta(\vartheta_2)$ hängen sowohl der Anstieg, als auch der Ordinaten Schnittpunkt von δ , dem Ort der Quelle, ab. 87
- 7.4. Normierte QB-Temperatur $\Theta(\delta)$ für verschiedene Temperaturdifferenzen der Reservoirs: $\vartheta_2 = 0$ (durchgezogen), $\vartheta_2 = 1$ (gestrichpunktet) und $\vartheta_2 = 2$ (gestrichelt). Die Temperaturmaxima von $\Theta(\delta)$ wandern für wachsendes ϑ_2 gegen das wärmere Reservoir. 88
- 8.1. Darstellung des Verhaltens von $f(\hat{t}) = \exp\left(-(1 - \hat{t})/\hat{t}_{n,0}\right)$ für verschiedene Werte von $\hat{t}_{n,0}$ 91

-
- 9.1. Oben: Schematische Darstellung der wichtigsten Teile eines n-Kanal Nano-FET. Unten: Darstellung des eindimensionalen, effektiven Potentials V^{eff} , von dem man annimmt, dass es linear über den Kanalbereich zwischen Source- und Drain-Kontakt abfällt. Grafik in Anlehnung an [90]. 98
- 9.2. Der normierte Strom $j(u)$ in Abhängigkeit der normierten Temperatur u für die Parameter $\beta = 100$ und $v_D = 1,0$. Der Gate-Parameter wurde dabei variiert: $v_G = -0,4$ (gepunktet), $v_G = 0,0$ (durchgezogen) und $v_G = 0,4$ (gestrichelt). 101
- 9.3. Darstellung von $F(u)$ bei einer effektiven Umgebungstemperatur von $\bar{u}_e = 0$ (≈ 0 K) und bei einem normierten spezifischen Wärmewiderstand von $r = 1$ (untere durchgezogene Linie) bzw. $r = 3$ (obere durchgezogene Linie). Analog dazu $F(u)$ bei einer effektiven Umgebungstemperatur von $\bar{u}_e = 0,1$ (≈ 406 K) und gleichen Widerständen (gestrichelte Linien). Die Schnittpunkte mit der Geraden u sind durch die schwarzen Kreise hervorgehoben und ergeben die stationären Temperaturwerte u^* . Die Projektion dieser Werte auf die Kurve $F(u) = j(u)$ für $\bar{u}_e = 0$ und $r = 1$ liefert die stationären Stromwerte im Transistor. 103

Tabellenverzeichnis

4.1. Elastische Konstanten C_{11} und C_{44} sowie die Gitterkonstanten d für AlAs und GaAs bei Raumtemperatur.	65
4.2. Effektive Kopplungen f_L und f_T in longitudinaler sowie in der zweifach entarteten transversalen Richtung für das Bulk-Material (intra-materielle Kopplungen). An den Grenzflächen zwischen zwei Materialien verwenden wir die mit Index I gekennzeichneten Kopplungen (inter-materielle Kopplungen). In der letzten Spalte sind die effektiven Massen.	65
8.1. Verhalten der veränderlichen Größen im System in der Nähe eines stabilen Fixpunkts T^* . Bei Vorgabe der Spannung U_2 und unter Berücksichtigung der linken Seite von $0 \leq a_1 < 1$ folgen die möglichen Änderungen von I und T , woraus sich die Änderungen in den erzeugten und dissipierten Wärmemengen pro Zeiteinheit (\dot{Q}_e und \dot{Q}_d) ergeben. Aus der rechten Seite von $0 \leq a_1 < 1$ resultieren dann die zugehörigen Stabilitätsbedingungen. .	94

Abkürzungsverzeichnis

AB	Anfangsbedingung
Abb.	Abbildung
Abbn.	Abbildungen
Abs.	Abschnitt
Absn.	Abschnitten
AlAs	Aluminiumarsenid
AMM	Acoustic Mismatch Model
Anh.	Anhang
BEOL	Back End Of Line
D	Device
DGL	Differentialgleichung
DJ	Double-Junction
EW	Eigenwerte
EWP	Eigenwertproblem
EZ	Einheitszelle
FEOL	Front End Of Line
FET	Feldeffekttransistor/Field-Effect Transistor
GaAs	Galliumarsenid
Ge	Germanium
Gl.	Gleichung
Gln.	Gleichungen
Kap.	Kapitel
Kapn.	Kapiteln
KDK	Kontakt-Device-Kontakt
LD	Linkes Device
LK	Linker Kontakt
LKB	Linker Kontakt-Bulk

MOSFET	Metal-Oxide-Semiconductor Field-Effect Transistor
NEGF	Non-Equilibrium Green's Functions
NNW _w	Nächste-Nachbar-Wechselwirkung
QB	Quantenbauelement
QWL	Quantisierte Wärmeleitfähigkeit
RB	Randbedingungen
RD	Rechtes Device
Ref.	Referenz
Refn.	Referenzen
RK	Rechter Kontakt
RKB	Rechter Kontakt-Bulk
Si	Silizium
SJ	Single-Junction
SMA	Single-Mode Approximation
Tab.	Tabelle
Tabn.	Tabellen
VONS	Vollständiges Orthonormalsystem

Einführende Worte

Zu allen Zeiten spielte die Thermodynamik, also die Lehre von der Umwandlung und Übertragung von Wärmeenergie, eine ganz besondere Rolle. Diente sie anfangs lediglich der Befriedigung ganz trivialer, aber essentieller Bedürfnisse, wie dem Bedürfnis nach Wärme oder der Zubereitung von Nahrung, sollte sie im weiteren Verlauf eine wesentliche Triebfeder bei der Entwicklung der Menschheit darstellen. Schon frühe einfache wasserkraft- oder windkraftgetriebene Maschinen, wie z. B. Mühlen oder Segelschiffe, ermöglichten es den Menschen die den thermodynamischen Vorgängen innewohnenden Kräfte nutzbar zu machen. Kräfte, die die Arbeitskraft eines einzelnen Menschen bei weitem übersteigen. Mit dem zunehmenden Verständnis dieser Phänomene, insbesondere der physikalischen Gesetze denen sie gehorchen, gelang mit Hilfe von immer leistungsfähigeren Wärmekraftmaschinen die kontrollierte Umwandlung von Wärmeenergie in mechanische Arbeit. Dies war der erste und wahrscheinlich einer der wichtigsten Schritte auf dem Weg zur modernen Industriegesellschaft.

Die physikalische Basis der Thermodynamik bilden der erste und zweite Hauptsatz der Thermodynamik [1, S. 157 ff.]. Während der erste Hauptsatz die Umwandlung einer Energieform in andere Energieformen quantifiziert und somit eine spezielle Formulierung des Energieerhaltungssatzes ist, bestimmt der zweite Hauptsatz in welcher Weise Energie transferiert wird. So z. B. lehrt er uns, dass ohne äußere geleistete Arbeit Wärme immer vom Ort höherer Temperatur zum Ort niedriger Temperatur transportiert wird.¹ Schon in dieser grundlegenden Aussage trifft man auf einen für dynamische Systeme so wichtigen Begriff: Transport.

Der Transport von Wärme in einem Festkörper wird durch zwei Mechanismen getragen. Zum einen beobachten wir in elektrisch leitfähigen Materialien den Transport von Wärme durch Elektronen, welcher oft und in guter Näherung durch das Wiedemann-Franz-Gesetz [2, 3] beschrieben werden kann. Es besagt, dass die thermische Leitfähigkeit

¹Formulierung des zweiten Hauptsatzes nach Rudolf Julius Emanuel Clausius (geb. 2. Januar 1822 in Köslin; gest. 24. August 1888 in Bonn).

eines elektrisch leitfähigen Materials direkt proportional zu dessen elektrischer Leitfähigkeit und Temperatur ist. Zum anderen wird ein Teil der Wärme der durch Phononen [4–6] transportiert, bei denen es sich um angeregte kollektive Gitterschwingungen eines Kristalls handelt. Während in elektrisch leitfähigen Materialien beide Prozesse nebeneinander existieren, wird der Wärmetransport in Dielektrika ausschließlich durch die Phononen getragen.

Bei der physikalisch-mathematischen Behandlung dieser Transportprobleme kann man prinzipiell zwischen zwei Betrachtungsweisen unterscheiden: Im makroskopischen Fall werden die beiden oben aufgeführten Transportmechanismen als diffusive Prozesse beschrieben und können im Rahmen der allgemeinen Wärmeleitgleichung (vgl. z. B. [7, S. 183 ff.]) abgehandelt werden. Im mesoskopischen und speziell im mikroskopischen Fall, der vielfältiger Gegenstand aktueller Forschungen ist, spielen hingegen die Existenz von Grenzflächen, die detaillierte atomare Struktur sowie die Wellennatur, sowohl von Elektronen als auch von Phononen, eine wesentliche Rolle. Im Zuge dessen, werden bei der Beschreibung solcher Phänomene häufig streutheoretische Ansätze gewählt. Welchen der beiden Ansätze man wählt, hängt also maßgeblich vom untersuchten System und der individuellen Fragestellung ab. Hinzu kommt, dass es in bestimmten Fragestellungen reichen mag, sich auf einen der beiden Ansätze zu konzentrieren, häufig aber erst eine Kombination dieser Ansätze ein umfassendes Verständnis erlaubt. In diesem Fall kann man von einer Hybridisierung der Methoden sprechen.

Gegenstand dieser Arbeit sind zwei Fragestellungen, bei deren Beantwortung man sich zum Einen rein im mikroskopischen Bereich befindet und zum Anderen in einem hybridisierten Bereich, in dem man eine Kombination aus elektronischen Quantentransport und diffusiven Wärmetransport betrachten muss. Im letzteren Fall kommt dabei den Elektronen eine zusätzliche Aufgabe zu. Neben dem oben beschriebenen Transport von Wärme handelt es sich hierbei vor allem um den Transport von Ladung, der in den von uns behandelten mikroskopischen Strukturen zunehmend durch die Gesetze der Quantenmechanik bestimmt wird. Diese sehr stark divergierenden Themenfelder und die damit verbundenen sehr unterschiedlichen methodischen Ansätze führten dazu, die Arbeit in zwei Teile zu untergliedern:

Der erste Teil analysiert den phononischen Wärmetransport in Nanoheterostrukturen unter Verwendung des Nichtgleichgewichts-Green-Funktionen-Formalismus (NEGF-

Formalismus)². Ausgehend von einer allgemeinen Ableitung der mathematischen Grundlagen, wird eine weitestgehend analytische Theorie des Tieftemperatur-Wärmetransports anhand eindimensionaler heterogener Kontakt-Device-Kontakt-, kurz KDK-Strukturen entwickelt. Sie reproduziert den Begriff der Quantisierten Wärmeleitfähigkeit (QWL), für deren Beobachtbarkeit konkrete analytische Bedingungen an die betrachtete Heterostruktur und dessen Temperatur gestellt werden können. Anschließend gelingt es, die Aussagen der eindimensionalen Resultate auf dreidimensionale heterogene KDK-Strukturen auszudehnen. Grundlage dafür sind die besonderen Eigenschaften der langwelligen Phononen, die es ermöglichen auch komplexe dreidimensionale Kristallstrukturen analytisch zu behandeln.

Der zweite Teil beschäftigt sich mit den thermischen Eigenschaften von integrierten Quantenbauelementen (QB) die in ihre Chipumgebung eingebettet sind. Insbesondere wird ein einfaches Modell entwickelt, bei dem die experimentell nicht zugängliche Temperatur der QB berechnet werden kann. Der Grundgedanke dabei ist, die durch quantenmechanische Ströme erzeugte Wärme in den QB und die durch diffusive Prozesse an die Umgebung abgeführte Wärme ins Gleichgewicht zu bringen. Das resultierende Fixpunktproblem kann dann analysiert und so die QB-Temperaturen als die stabilen Fixpunkte identifiziert werden. Dabei wird ebenfalls gezeigt, in welcher Form die QB-Temperaturen von der speziellen Chiparchitektur abhängen.

²Wir werden in dieser Arbeit die weit verbreitete englische Abkürzung NEGF für “Non-Equilibrium Green’s Functions” verwenden.

Teil I.

Quantisierung der phononischen Wärmeleitfähigkeit in Nanoheterostrukturen bei tiefen Temperaturen

1. Einleitung I

In den letzten Jahren ist ein zunehmendes Interesse an mezo- und mikroskopischen Wärmetransportproblemen zu beobachten. Dieses wird nicht zuletzt durch neue thermische Bauelemente wie thermische Dioden [8], thermische Transistoren [9], thermischer Logikgatter [10] und thermischer Speicher [11] gesteigert. Hinzu kommen die elektronischen Bauelemente, deren ungewollte Aufheizung die Leistungsfähigkeit der selben beeinträchtigt und gleichzeitig zu einer verringerten Lebensdauer und Zuverlässigkeit führt. In allen Fällen ist ein Verständnis der Wärmetransportmechanismen in diesen Systemen von grundlegender Bedeutung. Es kann dazu beitragen, die Entwicklungen in diesen Richtungen zu fördern und die auftretenden technischen Schwierigkeiten zu bewältigen.

Die dabei weiter voran getriebene Miniaturisierung solcher Bauelemente bringt Strukturen hervor, deren räumliche Ausdehnungen in der Größenordnung typischer Phononenwellenlängen sind. Dadurch verlieren interne Streuungen an Bedeutung und die Berücksichtigung der Wellennatur der Phononen wird immer wichtiger. In den sich herausbildenden Quantentransportproblemen werden daher heterogene Strukturen und die damit verbundenen Grenzflächenstreuereffekte immer wichtiger. Zur Behandlung dieser Art von Problemstellungen existieren verschiedene Ansätze und Methoden in der Literatur [12–16]. Speziell der NEGF-Formalismus ist ein weit verbreiteter und effizienter Ansatz für die üblicherweise numerische Untersuchung nanoskaliger Systeme. Mit ihm ist es vergleichsweise einfach möglich, komplexe heterogene QB-Strukturen zu behandeln. Dabei werden die oft als semiinfini angenommenen Kontakte, welche enormen Einfluss auf das Phononentransportproblem haben [17], exakt in die Berechnung mit einbezogen. Aber auch Ansätze basierend auf der Boltzmann Transportgleichung [18, 19], der Streumatrix-Methode [20–23], der *ab initio* Methode [24] sowie die Molekulardynamischen Methoden [25–27] haben sich ebenfalls bewährt.

Die Untersuchungen an strikt eindimensionalen, idealen Nanosystemen in der typischen KDK-Form führten zu dem Konzept der QWL. Es konnte gezeigt werden, dass die Wärmeleitfähigkeit $\Lambda(T)$ in Einheiten von $\pi^2 k_B^2 T / 3h$ quantisiert ist und das die

se Quantisierung universell ist für Fermionen [28, 29], Bosonen [30–34] und Anyonen [13, 35, 36]. In dieser Arbeit konzentrieren wir uns auf die phononische Wärmeleitfähigkeit, deren Quantisierung auch experimentell beobachtet werden konnte [37].

Es existieren drei essenzielle Bedingungen für das Auftreten dieses Effekts [30, 37]: Als Erstes muss der Beitrag der optischen Phononen zum Wärmetransport vernachlässigbar sein. Zweitens darf die Maximalfrequenz in der Phonondispersion der akustischen Moden keine Rolle spielen und drittens sollte perfekte Phononentransmission für alle relevanten akustischen Phononen existieren. In dieser Arbeit wird gezeigt, dass die ersten beiden Bedingungen in jedem KDK-System realisierbar sind, insofern ausreichend tiefe Temperaturen vorliegen. Die erste Bedingung wird dadurch erfüllt, dass die optischen Phononen aufgrund ihrer Minimalfrequenz (cut-off-Frequenz) größer Null für sehr tiefe Temperaturen nahezu unbesetzt sind und nur im verschwindenden Umfang zum Wärmetransport beitragen. Die zweite Bedingung kann erfüllt werden, weil die sich aus der Maximalfrequenz ergebenden Korrekturen exponentiell für kleiner werdende Temperaturen verschwinden [vgl. Gl. (3.23)]. Einen Schwerpunkt unserer Untersuchung stellt daher die dritte Bedingung dar, welche die Existenz einer perfekten Transmission verlangt. Für Systeme die eine oder mehrere Formen von Inhomogenitäten aufweisen, durch die Streuungen verursacht werden, ist zu erwarten, dass es für jede Temperatur zu Abweichungen von der perfekten Transmission kommt. In der Tat wurde in einer Reihe von numerischen Arbeiten eine Abweichung vom idealen Quantenwert gefunden, als Folge der Phononenstreuung an z. B. Substrukturen [38, 39], Oberflächenrauheit [40] oder strukturellen Defekten [23]. Auch experimentell ließen sich solche Effekte beobachten [37]. Es wurde jedoch auch klar, dass diese Effekte bei sich verringernden Temperaturen T an Bedeutung verlieren. Die Ursache hierfür ist, dass die letztendlich noch besetzten langwelligen Phononen immer weniger gestreut werden.

Für ein tieferes Verständnis dieser Zusammenhänge wären analytische Werkzeuge für den Quantenwärmetransport von großem Vorteil. Diese sind aber unglücklicherweise in der aktuellen Literatur so gut wie nicht zu finden. Lediglich für sehr einfache eindimensionale Systeme, bestehend aus zwei direkt gekoppelten homogenen Kontakten¹ (SJ) [41, 42] bzw. einem homogenen Device zwischen zwei homogenen Kontakten² (DJ) [20, 41], existieren analytische Formeln. Im Fall von DJ-Systemen werden sie üblicherweise auf Basis multipler Fabry-Pérot Reflexionen abgeleitet.

¹Dieses System besteht also aus einer einzelnen Grenzfläche senkrecht zur Transportrichtung.

²Dieses System besteht also aus zwei einzelnen Grenzflächen senkrecht zur Transportrichtung.

In Teil I dieser Arbeit werden die oben angeführten Punkte aufgegriffen und eine weitestgehend analytische Theorie der QWL entwickelt. Dazu werden im Kap. 2, der Standardliteratur folgend, in einer kurzen Abhandlung die grundlegenden mathematischen Werkzeuge für den phononischen Wärmetransport bereitgestellt, welche im Wesentlichen auf dem NEGF-Formalismus basieren.

In Kap. 3 entwickeln wir dann die vornehmlich analytische Theorie für den Quantenwärmetransport in einem sehr allgemeinen eindimensionalen KDK-System. Es besteht aus einem nahezu beliebigen Streugebiet (Device), welches sich zwischen zwei homogenen, nicht unbedingt identischen Kontakten befindet (vgl. Abb. 3.1). In unserem Modell berücksichtigen wir ausschließlich Nächste-Nachbar-Wechselwirkungen (NNWw) und vernachlässigen externe Potenziale [43, 44]. Ebenso berücksichtigen wir keinerlei anharmonische Effekte, was für Device-Längen kleiner als ungefähr 20 nm bei Raumtemperatur [45, 46] und für längere Devices für entsprechend tiefere Temperaturen zulässig ist. Unter Verwendung des NEGF-Formalismus [12, 20, 47–49] leiten wir einen Ausdruck für die frequenzabhängige Transmission des Wärmestroms ab. Dieser kompakte Ausdruck erlaubt es auf analytischem Wege die ersten Ordnungen einer Potenzreihe von $\Xi(\omega)$ um $\omega = 0$ zu berechnen. Im Rahmen der Landauertheorie [50–52] und unter Verwendung dieser Entwicklung ist es dann möglich eine systematische Tieftemperaturentwicklung der Wärmeleitfähigkeit herzuleiten.

Betrachtet man nun diese Entwicklung bis zur zweiten Ordnung,³ zeigt sich, dass die QWL in einer atomaren Kette mit beliebigem Streugebiet genau dann erscheint, wenn das Produkt aus Kopplungskonstante und Oszillatormasse in beiden Kontakten identisch ist. Dabei können wir einen Ausdruck für die Temperatur T_c angeben, oberhalb derer der Einfluss der dritten Ordnung der Temperaturentwicklung nicht mehr vernachlässigt werden kann. Dadurch legt sie gleichzeitig den Bereich fest, in dem die QWL als dominierender Effekt die Wärmeleitfähigkeit bestimmt. Das zentrale Resultat dabei ist, dass es nicht ausgeschlossen ist die QWL in vollständig heterogenen quasi-eindimensionalen KDK-Systemen zu finden. Aus diesem Grund scheint das Konzept der QWL robuster zu sein, als man es von früheren Untersuchungen [28, 30, 37] hätte erwarten können.

In Kap. 4 werden dann die bisher gefundenen Ergebnisse für die Wärmeleitung und deren Quantisierung auf quasi-eindimensionale 3D-Systeme erweitert. Dazu lösen wir das komplexe dreidimensionale Schwingungsproblem für die akustischen Moden in einem he-

³Der erste nicht verschwindende Term, nach dem Term führender Ordnung, ist von dritter Ordnung.

terogenen und harmonischen Effektivkristall in NNWw. Es stellt sich dabei heraus, dass alle relevanten Resultate in analoger Weise für jede der akustischen Moden gelten und zu vollkommen analogen Aussagen führen, insofern der Beitrag der optischen Phononen von geringer Bedeutung ist. Dies ist der Fall für Temperaturen die kleiner sind als eine bestimmte kritische Temperatur T_K , für die wir ebenfalls einen analytischen Ausdruck angeben können.

2. Nichtgleichgewichts-Green-Funktionen-Formalismus für Phononen

2.1. Gitterschwingungen in nanoskaligen Heterostrukturen

In Anlehnung an Zhang et al. [12] betrachten wir ein generisches System für den Phononentransport, welches Gegenstand dieser Untersuchung sein soll und schematisch in Abb. 2.1 dargestellt ist. Zu sehen sind die als Kugeln angedeuteten Atome, die durch ein interatomares Potential miteinander verbunden sind und so das zugrunde liegende nicht homogene Kristallsystem bilden. Das System ist weiter untergliedert in den beliebig gearteten “aktiven” Bereich, dem Device, das im Prinzip jede geometrische und materielle Struktur aufweisen kann.¹ Es befindet sich zwischen zwei semiinfiniten, materiell und strukturell homogenen Kontakten $s = 1, 2$, welche als thermodynamische Reservoirs dienen und die sich auf den konstanten Temperaturen T_s befinden.² Die Art der Ankopplungen des Devices an die Kontakte ist prinzipiell auch von beliebiger Gestalt.³ Darüber hinaus haben wir in Abb. 2.1 die Systemkomponenten zusätzlich in Atomgruppen unterteilt, deren dynamische Eigenschaften sich aufgrund ihrer Lage im Systemgefüge unterscheiden. Das Device besteht aus den Gruppen “Linkes Device” (LD), “Device” (D) und “Rechtes Device” (RD). Dabei sind die Atome in D ausschließlich mit anderen Device-Atomen gekoppelt. Die dynamischen Eigenschaften unterscheiden sich im Allgemeinen von denen in LD und RD, da diese auch Kopplungen zu den Kontaktatomen aufweisen.

¹Zum Beispiel ein Molekül, eine atomare Kette, eine Nanoröhre, ein Quantendraht oder eine Doppelbarriere.

²Durch die unendliche Ausdehnung dieser Struktur bezeichnen wir sie als offenes System.

³Es sind z. B. punktuelle, planare oder sich in irgendeiner Weise verzweigende Kontaktierungen denkbar.

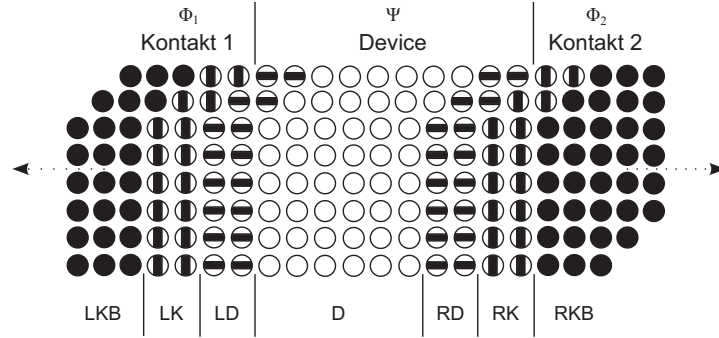


Abb. 2.1.: Schematische Darstellung einer typischen KDK-Struktur. Gezeigt sind außerdem die Atomgruppen LKB, LK, LD, D, RD, RK und RKB, welche sich aufgrund ihrer Lage im Systemgefüge in ihren dynamischen Eigenschaften unterscheiden. Die Atome in den Gruppen LD, D und RD bilden im Allgemeinen die Heterostruktur.

Ähnliches gilt für die Atome in den Kontakten, die in die Gruppen “Linker Kontakt-Bulk” (LKB) und “Linker Kontakt” (LK) sowie “Rechter Kontakt-Bulk” (RKB) und “Rechter Kontakt” (RK) eingeteilt wurden. So sind z. B. die Atome in LKB nur an andere Atome des linken Kontaktes ($s = 1$) gekoppelt und bilden in dreidimensionalen Strukturen den sogenannten Bulk⁴. Dem hingegen unterliegen die Atome in LK zusätzlich auch Wechselwirkungen mit Atomen aus dem Device, was sie wiederum durch eine andere Dynamik auszeichnet.

Unsere Aufgabe besteht nun darin, den Transport von Phononen [4–6] und damit den Teil der Wärme der durch die Gitterschwingungen des Kristalls transportiert wird, in einer solchen KDK-Struktur zu untersuchen. Die Dynamik des Kristalls ist dabei durch die gekoppelte Bewegung der N Atome gegeben, welche kollektive Gitterschwingungen ausführen. Sie werden mathematisch durch die dynamische Matrix $[D]$ und das zugehörige infinite Eigenwertproblem erfasst. In dieser Arbeit basiert die dynamische Matrix auf einer harmonischen Entwicklung⁵ des (Nd) -dimensionalen Kristallpotentials $V(\underline{R})$ (vgl. hierzu z. B. [6, S. 39–45] und [53, S. 83 f.]). Der Vektor $\underline{R}(t) = (\vec{R}_1(t), \dots, \vec{R}_N(t))^T = (R_{11}(t), \dots, R_{Nd}(t))^T$ enthält dabei die Nd Ortskoordinaten der N Atome in einem d -dimensionalen Raum als Funktion der Zeit.⁶ Wir vernachlässigen damit bewusst anhar-

⁴Bulk bzw. Bulkmaterial: englisch für das Volumenmaterial gleicher Zusammensetzung.

⁵Dies bedeutet, dass die mehrdimensionale Taylorentwicklung der Kristallpotenzialfunktion nach der zweiten Ordnung abgebrochen wird.

⁶ $R_{ki}(t)$ ist somit die Ortskoordinate des k -ten Atoms in Richtung von i .

monische Effekte wie die Phonon-Phonon-Streuung, da in dieser Näherung keine Kopplungen zwischen den Phononen erzeugt werden. Die anharmonischen Eigenschaften der Kristalle könnten wir im Rahmen der Störungstheorie behandeln [54, 55], indem wir die Anharmonizität als eine kleine Störung des harmonischen Kristalls betrachten. In den Arbeiten [45, 46] wurde jedoch gezeigt, dass anharmonische Effekte bei Raumtemperatur für charakteristische Device-Längen von bis zu 20 nm vernachlässigt werden können.⁷ Da wir uns zudem im Folgenden auf eine Tieftemperaturbetrachtung beschränken, stellt die harmonische Näherung auch grundsätzlich die geeignete Wahl dar. Die Atome sind dann nur wenig aus ihren Gleichgewichtslagen ausgelenkt und das Kristallpotenzial kann in genäherter Form⁸ geschrieben werden als

$$V(\underline{u}) = \frac{1}{2} \sum_{k,i,l,j} \Phi_{ki,lj} u_{ki} u_{lj} = \frac{1}{2} \underline{u}^T [\Phi] \underline{u}, \quad (2.1)$$

mit $\underline{u}(t) = \underline{R}(t) - \underline{R}^0 = (u_{11}(t), \dots, u_{Nd}(t))^T$ als (Nd) -dimensionaler Auslenkungsvektor aus der Gleichgewichtslage \underline{R}^0 . Die in Gl. (2.1) auftretende reelle,⁹ symmetrische und positiv definite $(Nd \times Nd)$ -Matrix

$$[\Phi]_{ki,lj} = \Phi_{ki,lj} := \left(\frac{\partial^2 V}{\partial u_{ki} \partial u_{lj}} \right)_{\underline{R}^0} \quad (2.2)$$

wird als harmonische Matrix bezeichnet. Mit der Potenzialnäherung (2.1) können wir die Nd Bewegungsgleichungen der N Atome formulieren. Es gilt:

$$M_k \frac{d^2}{dt^2} u_{ki} = - \frac{\partial V}{\partial u_{ki}} = - \sum_{l,j} \Phi_{ki,lj} u_{lj}. \quad (2.3)$$

Durch den Ansatz ebener Wellen und unter Verwendung einer Symmetrisierungstransformation $u_{ki/lj} := \tilde{u}_{ki/lj} / \sqrt{M_{k/l}}$ für die Auslenkungen des k -ten bzw. l -ten Atoms sind

⁷Für Device-Längen größer 20 nm sind entsprechend tiefere Temperaturen voraus zu setzen.

⁸Die nullte Ordnung der Entwicklung ist eine Konstante und spielt für die Dynamik keine Rolle (vgl. hierzu Gl. (2.3)). Wir setzen sie daher Null. Des Weiteren hat unser Potenzial $V(\underline{R})$ für den Fall, dass sich alle Atome an ihren Gleichgewichtspositionen \underline{R}^0 befinden, ein Minimum. Der Term erster Ordnung, als erste Ableitung des Potenzials am Punkt \underline{R}^0 , verschwindet somit.

⁹In speziellen Fällen kann die harmonische Matrix auch komplexe Einträge besitzen. Sie ist dann aber immer hermitesch, so dass ihre Eigenwerte weiterhin reell sind.

die Nd Gln. (2.3) als Eigenwertproblem (EWP) in Standardform darstellbar:

$$(\omega^2[E] - [D])\underline{u} = 0. \quad (2.4)$$

Wir haben an dieser Stelle die Tilde über \underline{u} wie üblich wieder weggelassen. Die neben der Einheitsmatrix $[E]$ in (2.4) auftretende Matrix $[D]$ wird dynamische Matrix genannt¹⁰ und hat aufgrund der obigen Transformation die symmetrische Form

$$[D]_{ki,lj} = D_{ki,lj} = \frac{\Phi_{ki,lj}}{\sqrt{M_k M_l}}. \quad (2.5)$$

Die dynamische Matrix $[D]$ erbt darüber hinaus alle Eigenschaften der harmonischen Matrix $[\Phi]$. Die Lösungen von (2.4) beschreiben die wellenartige Ausbreitung der Gitterschwingungen im Kristall. Für diese Wellen kommt es zu Streuvorgängen am gewöhnlich heterogenen Device, welches die translatorische Invarianz des Systems stört. Diese Streuungen zerlegen die Wellen in transmittierte und reflektierte Anteile, wobei für den Transport besonders die transmittierten Wellenanteile wichtig sind. Diese können mit Hilfe der Stromtransmissionsfunktion $\Xi(\omega)$ beschrieben werden. Die Berechnung von $\Xi(\omega)$ als Funktion der Frequenz ω geschieht im Rahmen dieser Arbeit unter Verwendung des NEGF-Formalismus (vgl. Abs. 2.3). Er erlaubt es uns letztlich auch den Wärmestrom $J(T)$ und die zugehörige Wärmeleitfähigkeit $\Lambda(T)$ in Abhängigkeit der Temperatur zu bestimmen.

2.2. Quantisierte Gitterschwingungen: Phononen

Der Begriff des Phonons ist nun schon einige Male gefallen und soll hier, basierend auf dem vorhergehenden Abschnitt etwas näher erläutert werden. Das Phonon entspringt der quantenmechanischen Betrachtung der im letzten Abschnitt vorgestellten harmonischen Gitterschwingungen, deren klassische N -Teilchen Hamiltonfunktion lautet:

$$H_{\text{harm}} = \frac{1}{2} \left(\underline{p}^T \underline{p} + \underline{u}^T [D] \underline{u} \right). \quad (2.6)$$

¹⁰In der Literatur ist die Bezeichnung dieser Matrix nicht eindeutig, häufig wird auch die Fouriertransformierte von $[D]$ als dynamische Matrix bezeichnet.

Wir haben hier, wie zuvor für die Auslenkungskoordinaten u_{ki} des k -ten Atoms, die normalen Impulse durch $p_{ki} := \sqrt{M_k} \tilde{p}_{ki}$ transformiert und anschließend die Tilde wieder entfernt. Weiterhin existiert aufgrund der Eigenschaften von $[D]$ eine orthogonale (bzw. unitäre) Transformationsmatrix $[T]$, welche $[D]$ in ihre Diagonalgestalt $[\Omega] = [T][D][T]^\dagger$ überführt. Der obere Index \dagger symbolisiert dabei, dass die Matrix von $[T]$ zu adjungieren ist. Aus der Orthogonalität (Unitarität) von $[T]$ folgt dann $[T]^\dagger[T] = [E]$ bzw. $[T]^{-1} = [T]^\dagger$. Damit lassen sich neue verallgemeinerte, kanonisch konjugierte Impulse und Koordinaten durch

$$\underline{\hat{p}} = [T]\underline{p} \quad \text{und} \quad \underline{\hat{u}} = [T]\underline{u} \quad (2.7)$$

definieren. Bezüglich derer ist die Hamiltonfunktion “diagonal”, d. h.

$$H_{\text{harm}} = \frac{1}{2} \left(\underline{\hat{p}}^T \underline{\hat{p}} + \underline{\hat{u}}^T [\Omega] \underline{\hat{u}} \right) = \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{Nd} \hat{p}_n^2 + \omega_n^2 \hat{u}_n^2, \quad (2.8)$$

wobei die ω_n^2 die Eigenwerte (EW) und damit die Diagonalelemente von $[\Omega]$ sind.¹¹ Gleichung (2.8) repräsentiert die klassische Hamiltonfunktion von Nd unabhängigen harmonischen Oszillatoren. Beim Übergang zur Quantenmechanik verlangen wir nun, dass sowohl die Auslenkungen u_{ki} und Impulse p_{ki} , als auch ihre verallgemeinerten Normalkoordinaten und Impulse \hat{u}_{ki} und \hat{p}_{ki} in der Hamiltonfunktion zu Operatoren werden, die die gewohnten Vertauschungsrelationen erfüllen. Es gilt also

$$[\mathbf{u}_{ki}, \mathbf{p}_{lj}] = i\hbar \delta_{ki} \delta_{lj} \quad \text{bzw.} \quad [\hat{\mathbf{u}}_n, \hat{\mathbf{p}}_{n'}] = i\hbar \delta_{nn'}. \quad (2.9)$$

Die Hamiltonfunktion geht damit in den Hamiltonoperator über. Analog zum eindimensionalen harmonischen Oszillator in der Quantenmechanik können wir an dieser Stelle Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren¹² [56, S. 297–299] definieren:

$$\mathbf{a}_n := \sqrt{\frac{\omega_n}{2\hbar}} \hat{\mathbf{u}}_n + i\sqrt{\frac{1}{2\hbar\omega_n}} \hat{\mathbf{p}}_n \quad \text{und} \quad \mathbf{a}_n^\dagger := \sqrt{\frac{\omega_n}{2\hbar}} \hat{\mathbf{u}}_n - i\sqrt{\frac{1}{2\hbar\omega_n}} \hat{\mathbf{p}}_n. \quad (2.10)$$

¹¹Auf der rechten Seite von (2.8) wurden die Nd Indizes ik durch n abgezählt.

¹²Weitere Bezeichnungen sind z. B. Leiteroperatoren, Auf- und Absteigeoperatoren oder Hebe- und Senkoperatoren.

Diese Operatoren¹³ erfüllen die folgenden bosonischen Kommutatorrelationen

$$[\mathbf{a}_n, \mathbf{a}_{n'}^\dagger] = \delta_{nn'} \quad \text{und} \quad [\mathbf{a}_n, \mathbf{a}_{n'}] = [\mathbf{a}_n^\dagger, \mathbf{a}_{n'}^\dagger] = 0. \quad (2.11)$$

Mit diesen Relationen lässt sich dann der Hamiltonoperator in sehr kompakter Form schreiben als

$$\mathbf{H}_{\text{harm}} = \sum_{n=1}^{Nd} \hbar \omega_n \left(\mathbf{a}_n^\dagger \mathbf{a}_n + \frac{1}{2} \right), \quad (2.12)$$

wobei $\hbar \omega_n$ die Energie der n -ten kollektiven Gitterschwingung ist, deren entsprechende Anregung Phonon genannt wird. Die Größe $\mathbf{N} = \mathbf{a}_n^\dagger \mathbf{a}_n$ bezeichnet man zudem als Besetzungszahloperator, dessen thermodynamischer Erwartungswert $\langle \mathbf{N} \rangle$ auf die Bose-Einstein-Verteilung führt. Sie beschreibt die mittlere Besetzungszahl eines Zustandes mit Frequenz ω bei gegebener Temperatur T . Für die Bose-Einstein-Verteilung gilt nach [57, S. 104]

$$\langle \mathbf{N} \rangle = N_V(\omega, T) = \frac{1}{e^{\hbar \omega / k_B T} - 1}, \quad (2.13)$$

mit k_B als die Boltzmannkonstante. Im Gegensatz zur Fermi-Dirac-Verteilung ist in (2.13) das chemische Potential $\mu = 0$, da es sich bei Phononen um keine echten Teilchen, sondern um Quasiteilchen ohne Teilchenzahlerhaltung handelt. Die phononenbedingte innere Energie des betrachteten Kristalls können wir dann als

$$E = \sum_{n=1}^{Nd} \hbar \omega_n \left(N_V(\omega_n, T) + \frac{1}{2} \right) \quad (2.14)$$

formulieren. Hierbei ist $E_n = \hbar \omega_n N_V(\omega_n, T)$ der im thermischen Mittel gelieferte Energiebeitrag des n -ten Oszillators zur Gesamtenergie E und

$$E_0 = \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{Nd} \hbar \omega_n \quad (2.15)$$

die temperaturunabhängige quantenmechanische Nullpunktsenergie.

¹³Das Symbol \dagger kennzeichnet im Fall von Operatoren den adjungierten Operator.

2.3. Der NEGF-Formalismus

2.3.1. Greenscher Formalismus

Um die innere Energie in Form von Gl. (2.14) beschreiben zu können, ist die Kenntnis der EW ω_n notwendig. Da nun aber selbst in mezo- und mikroskopischen Strukturen die Zahl der Atome, insbesondere durch das Vorhandensein der Kontakte, schnell sehr groß wird,¹⁴ ist die direkte Lösung des EWP's (2.4) nur schwer möglich. Wir wollen daher im Folgenden einen auf den greenschen Funktionen basierenden Ansatz, den NEGF-Formalismus, verwenden. Zuvor wird jedoch kurz die greensche Methode in ihren Grundgedanken vorgestellt. Betrachten wir dazu einen linearen Operator $[\hat{L}_\Psi]$ in seiner Matrixdarstellung,¹⁵ welcher auf einen Zustandsvektor $\underline{\Psi}$ wirkt. Einige häufig anzutreffende Probleme lassen sich dann in Form eines Gleichungssystems schreiben

$$[\hat{L}_\Psi]\underline{\Psi} = \underline{S}, \quad (2.16)$$

wobei \underline{S} eine beliebig geartete Störung (Inhomogenität) repräsentiert. Unter der Voraussetzung der Existenz der inversen Matrix von $[\hat{L}_\Psi]$ ist die greensche Matrix definiert als

$$[G] := [\hat{L}_\Psi]^{-1} \Leftrightarrow [\hat{L}_\Psi][G] = [E]. \quad (2.17)$$

Anhand der rechten Gleichung wird deutlich, dass sich die greensche Matrix $[G]$ auch immer selbst als eine Lösung zur Einheitsstörung $[E]$ interpretieren lässt. Da die greenschen Matrizen auf Differentialoperatoren zurück gehen, sind sie nicht eindeutig. Erst durch die Wahl systemangepasster Anfangs- oder Randbedingungen werden sie eindeutig, wodurch eine Vielzahl an greenschen Funktionen bzw. Matrizen denkbar ist. Zwei der wichtigsten Vertreter sind dabei die retardierte und die avancierte greensche Funktion. Der wesentliche Unterschied beider ist, dass die avancierte akausal, die retardierte hingegen kausal ist. Das heißt, Erstere beschreibt den mathematisch möglichen, aber unphysikalischen Fall des Auftretens der Wirkung vor der Ursache. Dem hingegen respektiert die Letztere das Kausalitätsprinzip. Im Allgemeinen handelt es sich bei den greenschen Funktionen um sehr abstrakte Gebilde, welche sich in der Regel einer physi-

¹⁴Die Zahl der Atome in einem cm^3 Festkörpermaterie liegt in der Größenordnung von 10^{23} .

¹⁵Denkbar sind hier z. B. diskretisierte Operatoren (finite Differenzen/Elemente), Operatoren in ihrer Basis-/Eigenbasisdarstellung oder Sätze von Differentialgleichungen in ihrer algebraischen Form (Fouriertransformation).

kalischen Anschauung entziehen [58, S. 7]. Ist schließlich $[G]$ bestimmt, können mit ihrer Hilfe die Lösung

$$\underline{\Psi} = [G]\underline{S}, \quad (2.18)$$

sowie eine Reihe von wichtigen physikalischen Größen ausgedrückt werden. Häufig reicht es dabei nur Teile von $[G]$ zu kennen, was den Rechenaufwand gegenüber der direkten Lösung des EWP zusätzlich reduziert.

2.3.2. NEGF-Formalismus für Phononen

Der in diesem Abschnitt behandelte Formalismus orientiert sich weitestgehend an den Werken [12, 47, 49] und ist der zentrale Ausgangspunkt für die Untersuchung der Transporteigenschaften des im Abs. 2.1 eingeführten heterogenen Systems. Der erste Schritt besteht nun in einer standardmäßigen Unterteilung der dynamischen Matrix (2.5) in eine Reihe von Submatrixblöcken, welche die einzelnen Systemkomponenten charakterisieren:

$$[D] = \begin{bmatrix} D_1 & \tau_1^\dagger & 0 \\ \tau_1 & D_D & \tau_2 \\ 0 & \tau_2^\dagger & D_2 \end{bmatrix}. \quad (2.19)$$

Die Submatrix $[D_D]$ beinhaltet dabei die dynamischen Informationen über das Device, während die semiinfiniten Submatrizen $[D_s]$ die Dynamik der Kontakte ($s = 1, 2$) beschreiben. Diese drei Systemkomponenten sind über die ebenfalls semiinfiniten Kopplungsmatrizen $[\tau_s]$ gekoppelt. Verwenden wir diese Darstellung der dynamischen Matrix im EWP (2.4) erhalten wir

$$\begin{bmatrix} \omega^2 E - D_1 & -\tau_1^\dagger & 0 \\ -\tau_1 & \omega^2 E - D_D & -\tau_2 \\ 0 & -\tau_2^\dagger & \omega^2 E - D_2 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \underline{\Psi}_1 \\ \underline{\Psi}_D \\ \underline{\Psi}_2 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \underline{0} \\ \underline{0} \\ \underline{0} \end{Bmatrix}. \quad (2.20)$$

Wir haben in (2.20) zusätzlich zu $[D]$ und $[E]$ auch den Auslenkungsvektor \underline{u} entsprechend der betrachteten KDK-Struktur untergliedert. Die Spaltenvektoren $\underline{\Psi}_{1/2}$ enthalten dabei sämtliche $N_s d$ Auslenkungs koordinaten der Kontaktatome, welche sich in LKB und LK bzw. in RKB und RK befinden. Dahingegen enthält der Spaltenvektor $\underline{\Psi}_D$ alle $N_D d$ Auslenkungs koordinaten der Device-Atome in LD, D und RD. Wir definieren nun weiter

die dynamischen Gleichungen der nicht ans Device gekoppelten Kontakte¹⁶ durch

$$[\omega^2 E - D_s] \underline{\Psi}_s^R = \underline{0}. \quad (2.21)$$

Die Lösungen $\underline{\Psi}_s$ des gekoppelten Systems können wir dann durch $\underline{\Psi}_s = \underline{\Psi}_s^R + \underline{\chi}_s$ ausdrücken, d. h. die gekoppelten Kontaktlösungen $\underline{\Psi}_s$ ergeben sich als eine Überlagerung der ungekoppelten Lösungen $\underline{\Psi}_s^R$ mit einem die Veränderung beschreibenden Vektor $\underline{\chi}_s$. In Ref. [12] wird gezeigt, dass sich die $\underline{\chi}_s$ in den Lösungen von (2.20) schreiben lassen als

$$\underline{\chi}_1 = [g_1(\omega)][\tau_1]^\dagger \underline{\Psi}_D \quad \text{und} \quad \underline{\chi}_2 = [g_2(\omega)][\tau_2]^\dagger \underline{\Psi}_D, \quad (2.22)$$

mit den greenschen Matrizen $[g_s(\omega)]$ der nicht an das Device gekoppelten Kontakte:

$$[g_s(\omega)] = [(\omega + i0^+)^2 E - D_s]^{-1}. \quad (2.23)$$

Wir haben in (2.23) die Frequenz ω infinitesimal von der reellen Achse in die komplexe obere Halbebene verschoben, was uns direkt die Retardierte greensche Matrix liefert [49]. Die Lösungen (2.22) hängen noch vom Lösungsvektor $\underline{\Psi}_D$ ab, der gegeben ist durch

$$\underline{\Psi}_D = [G_D(\omega)] \underline{S} \quad \text{mit} \quad [G_D(\omega)] := [\omega^2 E - D_D - \Sigma_1(\omega) - \Sigma_2(\omega)]^{-1}. \quad (2.24)$$

Wir bezeichnen $[G_D]$ als die Device-Greensmatrix, welche neben der dynamischen Matrix des Devices $[D_D]$, von den sog. Selbstenergiematrizen $[\Sigma_s(\omega)] = [\tau_s][g_s(\omega)][\tau_s]^\dagger$ abhängt. Die Lösung $\underline{\Psi}_D$ als $(N_D d)$ -dimensionaler Vektor stellt die Überführung des ursprünglich offenen (infiniten) Systems in ein geschlossenes System dar. Der bedeutende Einfluss der semiinfiniten Kontakte auf die endliche Device-Region wird dabei in exakter Weise durch die Selbstenergiematrizen $[\Sigma_s(\omega)]$ berücksichtigt. Der Störterm $\underline{S} = [\tau_1] \underline{\Psi}_1^R + [\tau_2] \underline{\Psi}_2^R$ hängt zum einen von den systemspezifischen, konstanten Kopplungsmatrizen $[\tau_s]$, zum anderen von den aus den Kontakten stammenden Wellen $\underline{\Psi}_s^R$ ab. Nach Gl. (2.24) können wir dann $\underline{\Psi}_D$ als die Antwort des Devices auf die aus den Kontakten kommenden Störwellen interpretieren.

Die Kenntnis der greenschen Matrizen, wie wir in den nächsten Abschnitten sehen

¹⁶Wir haben hier zu beachten, dass die Matrizen in (2.21) nur dann vollkommen äquivalent zu den Submatrizen in (2.20) sind, wenn wir auf der finiten Seite der Kontakte die RB einer starren Wand am Ort Null wählen. Dabei sind die Kopplungen zu selbiger entsprechend den Kontakt-Device-Kopplungen zu setzen.

werden, versetzt uns in die Lage so wichtige physikalische Größen, wie z. B. die Zustandsdichte oder die Stromtransmission, zu bestimmen. Mit deren Hilfe lassen sich dann die von uns betrachteten Transportprobleme beschreiben und anschließend untersuchen.

2.4. Phononischer Wärmetransport

Wie beispielsweise in den Refn. [12, 52] gezeigt wurde, können wir mit Hilfe der Device-Greensmatrix $[G_D(\omega)]$ und den Selbstenergiematrizen $[\Sigma_s(\omega)]$ den Wärmestrom $J(T_1, T_2)$ durch unser System in Landauer Form [50, 51] schreiben:

$$J(T_1, T_2) = \sum_{\alpha} \int_{\omega_{\alpha}}^{\infty} \frac{\hbar\omega}{2\pi} \Xi_{\alpha}(\omega) [N_V(\omega, T_1) - N_V(\omega, T_2)] d\omega. \quad (2.25)$$

In dieser Gleichung finden wir die in (2.13) definierte Bose-Einstein-Verteilung sowie der Stromtransmission $\Xi_{\alpha}(\omega)$ für die gilt:

$$\Xi_{\alpha}(\omega) = \text{Sp}[\Gamma_{1,\alpha}(\omega) G_{D,\alpha}(\omega) \Gamma_{2,\alpha}(\omega) G_{D,\alpha}^{\dagger}(\omega)]. \quad (2.26)$$

Das α läuft hierbei über alle möglichen Phononenmoden, deren Frequenzen ω durch ω_{α} nach unten beschränkt sind. Die akustischen Moden zeichnen sich dabei durch $\omega_{\alpha} = 0$ aus, wohingegen für die optischen Moden immer $\omega_{\alpha} > 0$ gilt. Letzterer Umstand hat eine besondere Bewandtnis bei der Untersuchung von phononischen Tieftemperaturphänomenen. Da bei ausreichend tiefen Temperaturen nur sehr kleine Frequenzen besetzt sind [vgl. (2.13)], spielen die optischen Phononen häufig lediglich eine untergeordnete Rolle oder sind sogar vollständig vernachlässigbar.¹⁷ In Gl. (2.26) bezeichnen wir außerdem mit “Sp” die Spur des gegebenen Matrixprodukts, wobei für die Matrizen $[\Gamma_{s,\alpha}(\omega)] := i[\Sigma_{s,\alpha}(\omega) - \Sigma_{s,\alpha}^{\dagger}(\omega)]$ gilt. Aus Gl. (2.25) folgt schließlich noch die Wärmeleitfähigkeit $\Lambda(T)$, als das Verhältnis aus fließendem Wärmestrom zur anliegenden Temperaturdifferenz

$$\Lambda(T) = \lim_{\Delta T \rightarrow 0} \frac{J(T, T')}{\Delta T} = \sum_{\alpha} \int_{\omega_{\alpha}}^{\infty} \frac{\hbar\omega}{2\pi} \Xi_{\alpha}(\omega) \frac{\partial N_V(\omega, T)}{\partial T} d\omega, \quad (2.27)$$

¹⁷In diesem Fall sprechen wir vom Ausfrieren der höherenergetischen Phononenmoden. Weitergehende Ausführungen dazu finden sich in Kap. 4.

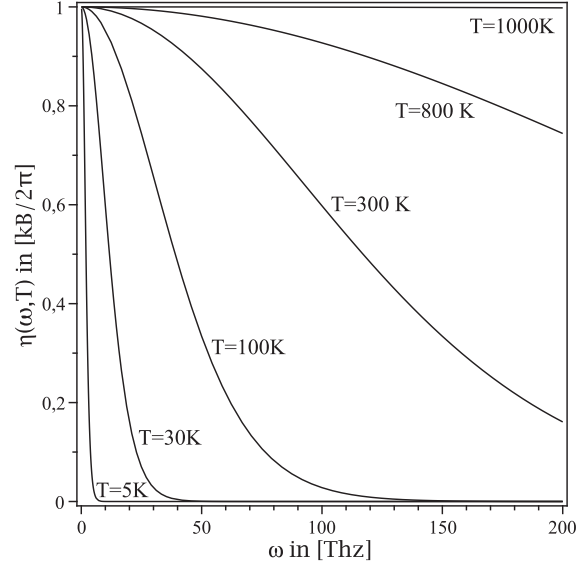


Abb. 2.2.: $\eta(\omega, T)$ als Funktion der Frequenz ω für verschiedene Temperaturen T . Geht $T \rightarrow \infty$, strebt $\eta(\omega, T)$ für alle ω gegen die Konstante $k_B/2\pi$.

wobei $\Delta T = T - T'$ gilt. Zur späteren Verwendung wollen wir an dieser Stelle noch den Hochtemperaturlimes für die Wärmeleitfähigkeit $\Lambda(T \rightarrow \infty)$ diskutieren und zeigen, dass in diesem Fall $\Lambda(T)$ maximal wird. Wir definieren hierzu die Funktion

$$\eta(\omega, T) := \frac{\hbar\omega}{2\pi} \frac{\partial N_V(\omega, T)}{\partial T} = \frac{\hbar^2\omega^2}{2\pi k_B T^2} \frac{e^{\hbar\omega/k_B T}}{(e^{\hbar\omega/k_B T} - 1)^2}, \quad (2.28)$$

die in Abb. 2.2 in Abhängigkeit von ω und für verschiedene Temperaturen veranschaulicht ist. Sie strebt für wachsende T gegen die Konstante $\eta(\omega, T \rightarrow \infty) = k_B/2\pi$, wodurch der Integrand in (2.27) für jedes α und jedes ω maximiert wird. Wir können somit im Allgemeinen für die maximale Wärmeleitfähigkeit schreiben:

$$\Lambda(T \rightarrow \infty) = \frac{k_B}{2\pi} \sum_{\alpha} \int_{\omega_{\alpha}}^{\infty} \Xi_{\alpha}(\omega) d\omega. \quad (2.29)$$

Vergleichen wir nun diese, für jedes KDK-System gültige Wärmeleitfähigkeit mit der Wärmeleitfähigkeit homogener Systeme¹⁸, gilt aufgrund fehlender Streuungen der Phononen am Device: $\Xi_{\alpha}(\omega) \leq \Xi_{h,\alpha}(\omega)$. Hierbei bezeichnen wir mit $\Xi_{h,\alpha}(\omega) = \Theta(\Omega_{\alpha} - \omega)$

¹⁸Im homogenen System seien die Kontakte und das Device aus ein und demselben Material in einer translationsinvarianten geometrischen Konfiguration.

die Transmissionen des homogenen KDK-Systems,¹⁹ welche sich mit Hilfe der Heaviside-Funktion $\Theta(\omega)$ sowie der Maximalfrequenz Ω_α der jeweiligen Phononenmode α darstellen lassen. Verwenden wir diese Ergebnisse in (2.29), ist die maximale Wärmeleitfähigkeit in homogenen Systemen bei hohen Temperaturen zu beobachten, deren Wert durch

$$\Lambda_h(T \rightarrow \infty) = \Lambda_\infty = \frac{k_B}{2\pi} \sum_\alpha [\Omega_\alpha - \omega_\alpha] \quad (2.30)$$

gegeben ist. An dieser Stelle sei betont, dass dieses Ergebnis eine Folge unserer speziellen Theorie ist, die für wachsende Temperaturen stark an Gültigkeit einbüßt. In realistischen Systemen und bei zunehmenden Temperaturen sind die Transportmechanismen weder durch harmonische, noch durch ballistische Theorien in vollständiger Art und Weise zu behandeln. Vielmehr sind dann Probengeometrien und deren Oberflächen, Defektstreuungen und Phononen-Phononen-Wechselwirkungen relevant, die einen Übergang in ein diffusives Transportregime vollziehen. Ein schöner, weitestgehend qualitativer Überblick über die temperaturabhängigen Transportregime von Phononen findet sich in Ref. [59, S. 244 ff.].

¹⁹Vergleiche hierzu auch die Ausführungen in Abs. 3.4.1.

3. Quantisierte Wärmeleitung in eindimensionalen Strukturen

Die nachfolgende Darstellung zum Wärmetransport, speziell des quantisierten Wärmetransports in eindimensionalen, nanoskaligen Heterostrukturen ist in weiten Teilen an den Artikel [60] angelehnt. Als zentrales Ergebnis erhalten wir konkrete analytische Bedingungen für das Auftreten der QWL. Aus der Analyse dieser Bedingungen folgt schließlich, dass die QWL in einer weitaus größeren Klasse von KDK-Systemen zu erwarten ist, als bisher angenommen.

3.1. Eindimensionale Stromtransmission

Wir beginnen unsere Untersuchung strikt eindimensionaler KDK-Systeme, in Bezug auf ihre Tieftemperatureigenschaften, mit der Berechnung der Stromtransmission $\Xi(\omega)$ entsprechend unserer NEGF-Formulierung (2.26). Wir betrachten dazu, ausgehend von unserem Grundmodell aus Abs. 2.1, die in Abb. 3.1 gezeigte atomare Kette in der typischen KDK-Struktur, deren Atome ausschließlich in NNWw miteinander interagieren. Die Parameter f_i bestimmen die Kopplungsstärke zwischen dem i -ten Atom mit der Masse M_i und dem $(i + 1)$ -ten Atom mit der Masse M_{i+1} . Das N -atomige Device sei dabei aus beliebigen Atomen aufgebaut und durch die Parameter f_i und M_i mit $i \in [1, N]$ charakterisiert. Der Kontakt $s = 1$ ($i \leq 0$) und der Kontakt $s = 2$ ($i \geq N + 1$) werden als homogene Strukturen vorausgesetzt,¹ welche jedoch nicht unbedingt identisch sein müs-

¹Wir beschränken uns hier auf eine EZ mit einem Atom in der Basis. Grundsätzlich sind auch mehrere Atome behandelbar, was im eindimensionalen Fall neben dem akustischen zu zusätzlichen optischen Zweigen in der Phononendispersion führen würde. Für unsere Betrachtung ist jedoch nur der akustische Zweig relevant. Außerdem werden wir im weiteren Verlauf dieser Arbeit zeigen, dass sich im Fall langwelliger Phononenmoden jedes homogene Kristallsystem auf ein effektiv orthorhombisches Kristallsystem mit einem effektiven Atom pro EZ reduziert. Der Ausgangskristall und der effektive Kristall weisen dann für kleine Frequenzen ω die gleichen akustischen Phononendispersionen auf,

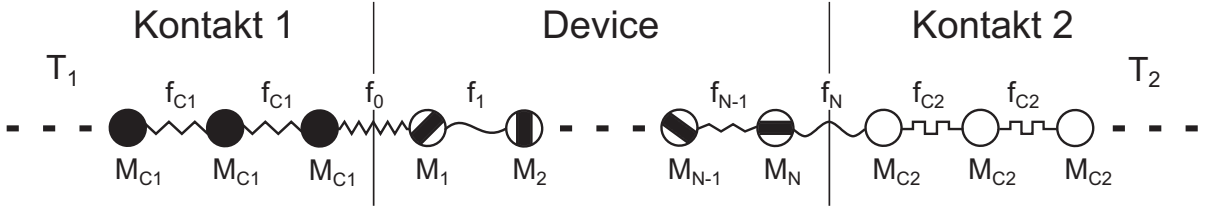


Abb. 3.1.: Schematische Darstellung einer eindimensionalen KDK-Struktur, bestehend aus einem beliebig gearteten Streubereich (Device), welcher an zwei homogene, nicht unbedingt identische Kontakte gekoppelt ist. Anders als der Einfachheit halber dargestellt, können die Kontakte auch aus einer EZ mit mehr als einem Atom in der Basis bestehen.

sen. Wir setzen daher $f_{i \leq 0} = f_{C1}$, $f_{i \geq N+1} = f_{C2}$, $M_{i \leq 0} = M_{C1}$ und $M_{i \geq N+1} = M_{C2}$. Die Kontakte dienen auch im eindimensionalen Fall als thermodynamische Reservoirs die sich auf den konstanten Temperaturen T_s befinden. Diese Annahmen führen dazu, dass wir in unserem System lediglich eine akustische Longitudinalmode² beobachten können, welche für den Transport von Wärme verantwortlich ist und für deren Transmissionsfunktion nach (2.26)

$$\Xi(\omega) = \text{Sp}[\Gamma_1(\omega)G_D(\omega)\Gamma_2(\omega)G_D^\dagger(\omega)] \quad (3.1)$$

gilt. Zur Bestimmung der in Gl. (3.1) auftretenden $(N \times N)$ -dimensionalen Matrizen haben wir in Anh. A.1, die notwendigen Matrizen $[D_D]$, $[\Sigma_s(\omega)]$ und $[\Gamma_s(\omega)]$ berechnet. Es zeigt sich, dass sich $[G_D(\omega)]$ durch das Inverse einer Tridiagonalmatrix der Gestalt

$$[M_N(\omega)] = \begin{bmatrix} a_1(\omega) & b_1 & 0 & \cdots & 0 \\ b_1 & a_2(\omega) & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & a_{N-1}(\omega) & b_{N-1} \\ 0 & \cdots & 0 & b_{N-1} & a_N(\omega) \end{bmatrix} \quad (3.2)$$

darstellen lässt. Die in ihr auftretenden Matrixelemente sind wie folgt definiert: Für $2 \leq i \leq N-1$ haben wir die Funktionen $a_i(\omega) = \omega^2 - (f_{i-1} + f_i)/M_i$ sowie für $1 \leq i \leq N-1$

die im engen Zusammenhang mit den Schallgeschwindigkeiten im Kristall stehen (vgl. Kap. 4).

²Dem folgend, vernachlässigen wir den Index α in den weiteren Abschnitten dieses Kapitels.

die Konstanten $b_i = f_i/\sqrt{M_i M_{i+1}}$. Darüber hinaus haben wir noch die ECKEelemente mit

$$a_1(\omega) = \omega^2 - \frac{f_0 + f_1}{M_1} - \frac{f_0^2}{M_{C1} M_1} g_1(\omega) \quad (3.3)$$

und

$$a_N(\omega) = \omega^2 - \frac{f_{N-1} + f_N}{M_N} - \frac{f_N^2}{M_N M_{C2}} g_2(\omega), \quad (3.4)$$

die über die greenschen (1×1) Oberflächenmatrizen $g_s(\omega)$ die Informationen über die zugehörigen semiinfiniten Kontakte (vgl. z. B. [12, 61]) beinhalten.³ Wir können sie schreiben als

$$g_1(\omega) = \left[(\omega + i0^+)^2 - \frac{f_{C1} + f_0}{M_{C1}} + \frac{f_{C1}}{M_{C1}} e^{ik_1(\omega)d_1} \right]^{-1} \quad (3.5)$$

und

$$g_2(\omega) = \left[(\omega + i0^+)^2 - \frac{f_N + f_{C2}}{M_{C2}} + \frac{f_{C2}}{M_{C2}} e^{ik_2(\omega)d_2} \right]^{-1}. \quad (3.6)$$

Dabei ist in $g_s(\omega)$ der Ausdruck⁴ $k_s(\omega) = (2/d_s) \arcsin(\omega/\omega_s^{max})$ die Dispersionsrelation, d_s die Gitterkonstante und $\omega_s^{max} = 2\sqrt{f_{Cs}/M_{Cs}}$ die Maximalfrequenz im entsprechenden Kontakt s .

Setzen wir in Gl. (3.1) $[G_D(\omega)]_{ij} = G_{ij}(\omega)$ sowie die von uns gefundene Darstellung der Gammamatrix (A.10) ein, bekommen wir für die Transmission

$$\Xi(\omega) = \gamma_1(\omega)\gamma_2(\omega)|G_{1N}(\omega)|^2. \quad (3.7)$$

Hier ist $\gamma_s(\omega) = C_s[g_s(\omega) - g_s^*(\omega)]$, $C_1 = if_0^2/M_{C1}M_1$ und $C_2 = if_N^2/M_N M_{C2}$. Wir sehen anhand dieser Formel, dass nicht die gesamte $(N \times N)$ Matrix $[M_N(\omega)]$ zu invertieren ist, sondern lediglich das Element $G_{1N}(\omega)$. Jedes Element in $[G_D(\omega)]$ kann durch

$$G_{ij} = \frac{1}{\det[M_N(\omega)]} \mu_{ij} \quad \text{mit} \quad \mu_{ij} = (-1)^{i+j} m_{ij} \quad (3.8)$$

bestimmt werden, wobei μ_{ij} der sog. Kofaktor ist. Er berechnet sich aus der Determinante m_{ij} , die wir bekommen, indem wir die i -te Zeile und j -te Spalte von $[M_N(\omega)]^T = [M_N(\omega)]$ streichen. Der für uns relevante Kofaktor m_{1N} ist dann sehr einfach zu bestimmen, denn durch die Streichung der ersten Zeile und der letzten Spalte geht unsere Matrix $[M_N(\omega)]$

³Für die Beschreibung einer KDK-Struktur mit (3.2) ist folglich $N \geq 2$ zu wählen.

⁴Verwenden wir i nicht als Index, hat es die Bedeutung der imaginären Einheit.

in eine obere Dreiecksmatrix über, die auf der Hauptdiagonale die Elemente b_i hat. Die Determinante lautet somit:

$$\mu_{1N} = (-1)^{1+N} \prod_{i=1}^{N-1} b_i = (-1)^{N-1} \prod_{i=1}^{N-1} \frac{f_i}{\sqrt{M_i M_{i+1}}}. \quad (3.9)$$

Dieses Ergebnis eingesetzt in die Gln. (3.7) und (3.8) führt uns auf eine besonders kompakte Formulierung der Stromtransmission:

$$\Xi(\omega) = C \frac{\gamma_1(\omega)\gamma_2(\omega)}{|\det[M_N(\omega)]|^2} \quad \text{mit} \quad C = \prod_{i=1}^{N-1} \frac{f_i^2}{M_i M_{i+1}}. \quad (3.10)$$

Im Gegensatz zur fundamentalen Gl. (3.1) ermöglicht uns diese Darstellung der Transmission eine analytische Entwicklung für kleine Frequenzen.⁵ In Anh. A.1 zeigen wir, dass für $\Xi(\omega)$ eine Taylorentwicklung um $\omega = 0$ existiert, mit ausschließlich geraden Entwicklungstermen:⁶

$$\Xi(\omega) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\Xi_{2n}}{(2n)!} \omega^{2n}. \quad (3.11)$$

Als Entwicklungskoeffizienten haben wir $\Xi_{2n} = d^{2n}\Xi(\omega)/d\omega^{2n}|_{\omega=0}$, wobei sich zeigen wird, dass das Absolutglied Ξ_0 von besonderer Bedeutung ist. Wir haben es in Anh. A.2 analytisch berechnet mit dem Ergebnis

$$\Xi_0 = \frac{4\sqrt{y}}{[1 + \sqrt{y}]^2}. \quad (3.12)$$

In dieser Gleichung haben wir das dimensionslose Verhältnis $y := M_{C2}f_{C2}/M_{C1}f_{C1}$ eingeführt, welches lediglich von den Kontaktparametern abhängt. Ξ_0 beinhaltet somit keinerlei Informationen über das Streugebiet (Device). Mit Hilfe der binomischen Ungleichung $4ab \leq [a+b]^2$ sowie $a = M_{C1}f_{C1} \geq 0$ und $b = M_{C2}f_{C2} \geq 0$ wird aus (3.12) deutlich, dass Ξ_0 nur Werte aus $[0, 1]$ annehmen kann. Den speziellen, im weiteren Verlauf noch sehr wichtigen Wert $\Xi_0 = 1$ erhalten wir nur für $a = b$.

⁵Für die angestrebte Tieftemperaturuntersuchung haben nur kleine Frequenzen ω eine Relevanz, da nur diese bei tiefen Temperaturen besetzt sind [vgl. Gl. (2.13)].

⁶Bei $\Xi(\omega)$ handelt es sich um eine sog. gerade Funktion mit $\Xi(\omega) = \Xi(-\omega)$, deren Entwicklung um $\omega = 0$ keine ungeraden Entwicklungsterme enthält.

3.2. Stromtransmission und Einteilchen-Phononentransmission

Für ein besseres Verständnis wollen wir Gl. (3.10) etwas detaillierter untersuchen. Insbesondere soll in diesem Abschnitt die Frage geklärt werden, ob es sich bei (3.10) tatsächlich um eine Stromtransmission handelt. Zu diesem Zweck modifizieren wir unser Modellsystem in Abb. 3.1, indem wir unser Device an beiden Seiten (Index $i = 0$ und $i = N + 1$) um jeweils ein Kontaktatom des zugehörigen Kontakts erweitern. Auf diese Weise bekommen wir ein äquivalentes $(N + 2)$ -atomiges Device, welches die gleichen Transmissionseigenschaften zeigt, wie das ursprüngliche N -atomige Device.⁷ In diesem modifizierten System nehmen die Oberflächengreensfunktionen (3.5) und (3.6) mit $g_s(\omega) = -(1/\omega_s^2) \exp[ik_s(\omega)d_s]$ und $\omega_s = (1/2)\omega_s^{max}$ eine besonders einfache Form an. Das Einsetzen dieser Ausdrücke in $\gamma_s(\omega)$ [vgl. (3.10)] ergibt:

$$\gamma_s(\omega)\gamma_{s'}(\omega) = 4\omega_s^2\omega_{s'}^2 \sin[k_s(\omega)d_s] \sin[k_{s'}(\omega)d_{s'}]. \quad (3.13)$$

Mit den vereinfachten Oberflächengreensfunktionen können wir zusätzlich die lokale Oberflächenzustandsdichte entsprechend der Gl. (40) in [12] berechnen:

$$\rho_s(\omega) = i \frac{\omega}{\pi d_s} [g_s(\omega) - g_s^*(\omega)] = \frac{2\omega}{\pi d_s \omega_s^2} \sin[k_s(\omega)d_s]. \quad (3.14)$$

Die lokale Oberflächenzustandsdichte ist beeinflusst von der Kopplung zwischen Device und Kontakt, weshalb sie nicht identisch ist mit der Bulkzustandsdichte $\rho_s^0(\omega)$ tief in den Kontakten.⁸ Letztere ist gegeben durch $\rho_s^0(\omega) = (\omega/\pi d_s \omega_s^2) \sin[k_s(\omega)d_s]^{-1} = 1/[\pi \nu_s(\omega)]$, wobei $\nu_s(\omega) = d\omega(k_s)/dk_s = (d_s \omega_s^2/\omega) \sin[k_s(\omega)d_s]$ die Gruppengeschwindigkeit im Kontakt s ist. Diese beiden Typen von Zustandsdichten stehen miteinander in Relation durch

$$\rho_s(\omega) = 2 \sin^2[k_s(\omega)d_s] \rho_s^0(\omega). \quad (3.15)$$

Führen wir nun das Produkt $\rho_s(\omega)\nu_{s'}(\omega)$ ein, so können wir (3.13) auch schreiben als

$$\gamma_s(\omega)\gamma_{s'}(\omega) = 2\pi\omega_s^4(d_s/d_{s'})\rho_s(\omega)\nu_{s'}(\omega). \quad (3.16)$$

⁷Wir haben hier natürlich den Systemparameter C entsprechend der Dimension von $[M_{N+2}(\omega)]$ zu wählen.

⁸Wir können hierfür eine homogene Kette bestehend aus dem Kontaktmaterial betrachten.

Weil das Produkt $\gamma_s(\omega)\gamma_{s'}(\omega)$ unabhängig ist von der Reihenfolge der Indizes, muss die rechte Seite von (3.16) die gleiche Eigenschaft besitzen. Mit Hilfe der Dispersionsrelation $k_s(\omega)$ folgt für die Transmission

$$\Xi(\omega) = \rho_s^0(\omega)\nu_{s'}(\omega)\pi C \frac{d_s}{d_{s'}} \frac{4\omega_s^2\omega^2 - \omega^4}{|\det[M_{N+2}(\omega)]|^2}, \quad (3.17)$$

woraus schließlich für $s \neq s'$ die Stromtransmission für Phononen resultiert:

$$\Xi(\omega) = \rho_s^0(\omega)\nu_{s'}(\omega)T_{ss'}(\omega) = \rho_{s'}^0(\omega)\nu_s(\omega)T_{s's}(\omega). \quad (3.18)$$

Wegen der allgemeinen Struktur von (3.18) können wir

$$T_{ss'}(\omega) = \pi C \frac{d_s}{d_{s'}} \frac{4\omega_s^2\omega^2 - \omega^4}{|\det[M_N(\omega)]|^2} \quad (3.19)$$

als die Einteilchen-Phononentransmission interpretieren, in der die Zustandsdichte des Ursprungskontakts und die Phononengeschwindigkeit im Zielkontakt abgespalten wurde.

3.3. Tieftemperaturentwicklung der Wärmeleitfähigkeit

Setzen wir weiter ballistischen Transport voraus, kann die Wärmeleitfähigkeit nach (2.27) für den Fall einer einzigen Phononenmode geschrieben werden als

$$\Lambda(T) = \frac{\hbar^2}{2\pi k_B T^2} \int_0^\Omega \Xi(\omega) \frac{\omega^2 e^{\hbar\omega/k_B T}}{(e^{\hbar\omega/k_B T} - 1)^2} d\omega. \quad (3.20)$$

Hierbei ist $\Omega := \min\{\omega_s^{max}, s = 1, 2\}$ die kleinere der beiden Maximalfrequenzen in den Kontakten.⁹ Verwenden wir in (3.20), also der Gleichung für die Wärmeleitfähigkeit, die von uns gefundene Entwicklung der Transmission (3.11) und führen gleichzeitig die Setzungen $x := \hbar\omega/k_B T$ sowie $\beta := k_B T/\hbar\Omega$ ein, können wir einen dimensionslosen Ausdruck für die Wärmeleitfähigkeit angeben:¹⁰

$$\lambda(\beta) = \frac{\Lambda}{\Lambda_\infty} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\Xi_{2k}\Omega^{2k}}{(2k)!} \left[\int_0^{1/\beta} \frac{x^{2(k+1)} e^x}{(e^x - 1)^2} dx \right] \beta^{2k+1}. \quad (3.21)$$

⁹Zum Transport können nur Phononen beitragen deren Frequenzen in den Kontakten erlaubt sind.

Diese Frequenzen sind durch die kleinere der beiden Maximalfrequenzen nach oben beschränkt.

¹⁰An dieser Stelle setzen wir voraus, dass wir die Summation und die Integration vertauschen können.

Hierbei haben wir $\Lambda(T)$ durch $\Lambda_\infty = k_B \Omega / 2\pi$ nach Gl. (2.30) auf die maximale Wärmeleitfähigkeit der zugehörigen homogenen Kette mit der Maximalfrequenz Ω normiert.¹¹ Führen wir nun noch die Integration in (3.21) aus, ergibt sich für die normierte Wärmeleitfähigkeit

$$\lambda(\beta) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{2(k+1)!}{(2k)!} \zeta[2(k+1)] \Xi_{2k} \Omega^{2k} \beta^{2k+1} - \lambda_{2k}(\beta), \quad (3.22)$$

in der $\zeta[2(k+1)]$ die Riemannsche Zeta-Funktion ist. Der letzte Term auf der rechten Seite von (3.22) ist eine Folge der Existenz der Maximalfrequenz Ω und kann als eine zusätzliche Korrektur angesehen werden. Für sie können wir explizit schreiben

$$\begin{aligned} \lambda_{2k}(\beta) &= \frac{\Xi_{2k} \Omega^{2k}}{(2k)!} \left[\int_{1/\beta}^{\infty} \frac{x^{2(k+1)} e^x}{(e^x - 1)^2} dx \right] \beta^{2k+1} \\ &\approx \frac{\Xi_{2k} \Omega^{2k}}{(2k)!} \frac{e^{-1/\beta}}{\beta}. \end{aligned} \quad (3.23)$$

Für den zweiten Schritt von (3.23) haben wir den Integranden für große x (kleine Temperaturen) entwickelt und nur den Term führender Ordnung berücksichtigt. An dieser Näherung wird ersichtlich, dass $\lambda_{2k}(\beta)$ aufgrund der exponentiellen Abhängigkeit von $1/\beta$ für tiefe Temperaturen praktisch immer vernachlässigt werden kann. Daraus und mit Gl. (3.22) folgt schließlich für die Tieftemperaturentwicklung der Wärmeleitfähigkeit bis zur dritten Ordnung:

$$\lambda(\beta) = \frac{\pi^2}{3} \Xi_0 \beta + \frac{2\pi^4}{15} \Xi_2 \Omega^2 \beta^3. \quad (3.24)$$

Auf Basis dieser Gleichung können wir nun die wichtigsten Eigenschaften der Tieftemperaturwärmeleitfähigkeit eines sehr allgemeinen KDK-Systems analytisch untersuchen. Wir werden in diesem Zusammenhang den Begriff der QWL aufgreifen und die Bedingungen ihrer Beobachtbarkeit erarbeiten und diskutieren.

3.4. Quantisierte Wärmeleitfähigkeit

Das Konzept der QWL für den phononischen Wärmetransport geht auf Rego und Kirzenow [13, 30] zurück und resultiert aus Gl. (2.27). In ihren Überlegungen gingen sie von einer perfekten adiabatischen Ankopplung eines ballistischen Quantenleiters an die

¹¹ Λ_∞ ist dann auch die obere Schranke der Wärmeleitfähigkeit $\Lambda(T)$ im heterogenen System.

Kontakte aus und vernachlässigten die Existenz von Maximalfrequenzen $\Omega_{\alpha'}$, der α' akustischen Moden. Dadurch konnten sie für die Transmission $\Xi_{\alpha'}(\omega) = 1$ für alle Frequenzen ω setzen.¹² Die anschließende Integration von 0 bis ∞ ergab für die akustischen Moden

$$\Lambda_{\alpha'}(T) = \frac{\pi^2 k_B^2 T}{3h} n_{\alpha'} \Rightarrow \lambda_{\alpha'}(\beta) = \frac{\pi^2 \beta}{3} n_{\alpha'}, \quad (3.25)$$

worin $n_{\alpha'}$ die Anzahl der akustischen Moden angibt. Die normierte Wärmeleitfähigkeit der akustischen Moden ist also in $n_{\alpha'}$ Pakete der Größe $\pi^2 \beta / 3$ quantisiert. Unter den gemachten Annahmen ist dieses Ergebnis auf dem gesamten Temperaturbereich für jedes quasi-eindimensionale homogene System gültig.

3.4.1. Das homogene Kontakt-Device-Kontakt-System

Wir wollen hier den homogenen Fall im Rahmen unseres eindimensionalen KDK-Systems aufgreifen und analytisch zeigen, dass unsere Ableitungen in den letzten Abschnitten bekannte Ergebnisse reproduzieren. Wir werden darüber hinaus sehen, dass die Darstellung (3.25) selbst im homogenen Fall streng genommen nur für kleine Temperaturen Gültigkeit besitzt.

Wir setzen im Folgenden $f_i := f$ und $M_i := M$ für alle i . Durch diese Einschränkung vereinfachen sich die Elemente der Matrix (3.2). Mit der Abkürzung $\omega_0^2 := f/M$ sowie $k_s(\omega) := k(\omega)$, $d_s := d$ und $g_s(\omega) = -(1/\omega_0^2) \exp(ik(\omega)d)$ erhalten wir dann für die Matricelemente:

$$a_{2 \leq i \leq N-1}(\omega) := a(\omega) = -2\omega_0^2 \cos[k(\omega)d], \quad (3.26)$$

sowie mit den Gln. (3.3) und (3.4)

$$a_{1/N}(\omega) := a_0(\omega) = -\omega_0^2 \exp[-ik(\omega)d]. \quad (3.27)$$

Trivialerweise ergibt sich für $b_i := \omega_0^2$ ($1 \leq i \leq N-1$). Wir wollen nun die Determinante $m_N(\omega) := \det[M_N(\omega)]$ für diese vereinfachte Matrix bestimmen. Hierzu nutzen wir die leicht zu verifizierende rekursive Formel

$$m_{N+1}(\omega) = a_0(\omega)m_N(\omega), \quad (3.28)$$

¹²Bei der Berücksichtigung der Maximalfrequenzen $\Omega_{\alpha'}$ gilt für die Transmissionen $\Xi_{\alpha'}(\omega) = \Theta(\Omega_{\alpha'} - \omega)$. Dies führt zu "komplexen" Korrekturen, analog zu denen die wir in Gl. (3.23) diskutiert haben.

für $N \geq 2$ und mit $m_1(\omega) := a_0(\omega) - \omega_0^4/a_0(\omega)$ als Startfunktion der Rekursion. Ausgehend von diesen Gleichungen und unter Verwendung der Methode der vollständigen Induktion ergibt sich dann die Determinante zu

$$m_N(\omega) = -2i\omega_0^{2N} e^{i(N-1)k(\omega)a} \sin(k(\omega)a) \Rightarrow |m_N(\omega)|^2 = 4\omega_0^{4N} \sin^2(k(\omega)a). \quad (3.29)$$

Für den Zähler in unserer Transmissionsfunktion (3.10) gilt im homogenen Fall mit $\Omega = 2\omega_0$:

$$C\gamma_1(\omega)\gamma_2(\omega) = C\gamma(\omega)^2 = \begin{cases} 4\omega_0^{4N} \sin^2(k(\omega)a) & \text{für } \omega/\Omega \leq 1, \\ 0 & \text{für } \omega/\Omega > 1. \end{cases} \quad (3.30)$$

Dieses Ergebnis in Kombination mit (3.29) ermöglicht es uns, die Transmission der homogenen Kette in sehr kompakter Form mit Hilfe der Heaviside-Funktion auszudrücken. Wir haben also:

$$\Xi(\omega) = \Theta(\Omega - \omega). \quad (3.31)$$

Nun sind wir in der Lage die Wärmeleitfähigkeit nach (2.27) zu berechnen, indem wir erneut von unseren Definitionen $x := \hbar\omega/k_B T$, $\beta := k_B T/\hbar\Omega$ und $\Lambda_\infty = k_B \Omega/2\pi$ Gebrauch machen. Wir erhalten dann:

$$\lambda_h(\beta) = \beta \int_0^{1/\beta} \frac{x^2 e^x}{(e^x - 1)^2} dx. \quad (3.32)$$

Integrieren wir diese Gleichung über x , so bekommen wir die dimensionslose Wärmeleitfähigkeit

$$\lambda_h(\beta) = \frac{1}{\beta} \left(e^{-\frac{1}{\beta}} - 1 \right)^{-1} - 2\beta \text{dilog} \left(e^{\frac{1}{\beta}} \right). \quad (3.33)$$

In unserem Endresultat finden wir die Dilogarithmus-Funktion mit der speziellen Definition

$$\text{dilog}(t) := \int_1^t \frac{\ln(s)}{1-s} ds. \quad (3.34)$$

Die normierte Wärmeleitfähigkeit $\lambda_h(\beta)$ der homogenen Kette ist in der Abb. 3.2 als durchgezogene Kurve dargestellt. Für kleine β , also für kleine Temperaturen, beobachten wir ein lineares Verhalten der Wärmeleitfähigkeit, welches für wachsende β in eine Konstante übergeht. Der grundlegende Wechsel im Verlauf der Wärmeleitfähigkeit findet bei $\beta = 1/2$ bzw. $T = \hbar\Omega/2k_B$ statt. Sie hängt also in charakteristischer Weise vom be-

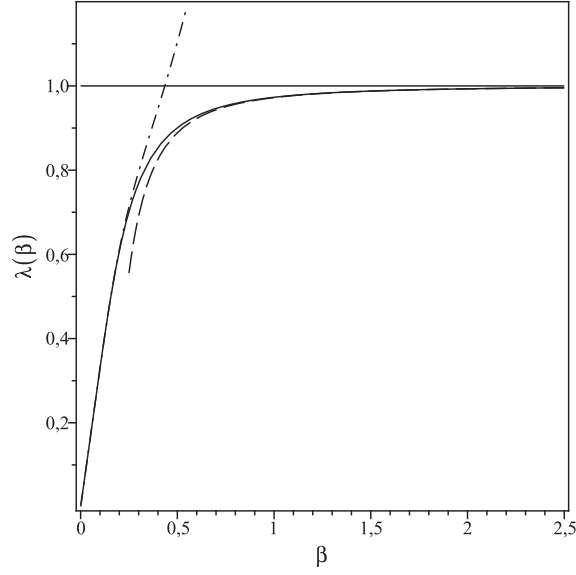


Abb. 3.2.: Normierte thermische Leitfähigkeit $\lambda_h(\beta)$ für eine homogene Atomkette (durchgezogen) und die zugehörigen Näherungen $\lambda_h^\infty(\beta)$ (gestrichelt) und $\lambda_h^0(\beta)$ (gestrichpunktet). Ein charakteristischer Wechsel im Verhalten der Wärmeleitfähigkeit findet sich bei $\beta = 1/2$.

trachteten Material ab. Darüber hinaus sind noch die entsprechenden Approximationen von $\lambda_h(\beta)$ sowohl für kleine, als auch große β dargestellt. Im Fall großer β führt uns eine Taylorentwicklung von $\lambda_h(\beta)$ bis zur zweiten Ordnung auf die Näherung (vgl. Anh. A.3)

$$\lambda_h^\infty(\beta) \approx 1 - \frac{1}{36\beta^2} = \lambda_1^\infty(\beta) + \lambda_2^\infty(\beta). \quad (3.35)$$

Im entgegengesetzten Fall kleiner β benutzen wir die im Anh. A.4 abgeleitete asymptotische Entwicklung von $\lambda_h(\beta)$ mit dem Ergebnis

$$\lambda_h^0(\beta) \approx \frac{1}{3}\pi^2\beta - \left(2 + \frac{1}{\beta}\right)e^{-\frac{1}{\beta}} = \lambda_1^0(\beta) + \lambda_2^0(\beta). \quad (3.36)$$

Sie zeigt als Term führender Ordnung die lineare Abhängigkeit der normierten Wärmeleitfähigkeit von β . Dieser entspricht dem normierten Quant in (3.25) für $n_{\alpha'} = 1$, da wir in dem von uns betrachteten System lediglich eine akustische Longitudinalmode vorfinden. Aus den beiden Gln. (3.35) und (3.36) können wir weiter zwei kritische Temperaturen β_∞ und β_0 berechnen. Oberhalb bzw. unterhalb dieser Temperaturen verhält sich

unsere Wärmeleitfähigkeit im Wesentlichen konstant bzw. linear. Wir definieren dazu die absoluten Abweichungen $\epsilon_i := |\lambda_2^i(\beta)/\lambda_1^i(\beta)|$ durch das Verhältnis des Korrekturterms $\lambda_2^i(\beta)$, zum Term führender Ordnung $\lambda_1^i(\beta)$ mit $i = 0, \infty$. Für große Temperaturen β erhalten wir auf diesem Wege

$$\epsilon_\infty = \frac{1/36\beta^2}{1} \Rightarrow \beta_\infty = \frac{1}{6\sqrt{\epsilon_\infty}}. \quad (3.37)$$

Wir haben hier natürlich die positive und damit physikalische Lösung gewählt. Um auch für kleine β einen analytischen Ausdruck für β_0 zu bekommen, vernachlässigen wir in (3.36) zusätzlich den Term $2e^{-1/\beta}$. Als Näherung folgt dann:

$$\epsilon_0 = \frac{e^{-\frac{1}{\beta}}/\beta}{\pi^2\beta/3} \Rightarrow \frac{1}{\beta}e^{-\frac{2}{\beta}} = \frac{1}{3}\epsilon_0\pi^2\beta. \quad (3.38)$$

Diese spezielle Gleichung kann unter Verwendung der sog. LambertW-Funktion gelöst werden. Von mehreren möglichen Lösungen erweist sich

$$\beta_0 = -\frac{1}{2\text{LambertW}(-1, -\sqrt{3\epsilon_0\pi^2/6})} \quad (3.39)$$

als die richtige Wahl. Zur Veranschaulichung dieser Größen, wollen wir das Beispiel Silizium betrachten und setzen nach [34] für die Parameter $f = 16,9 \text{ N/m}$, $M = 4,7 \cdot 10^{-26} \text{ kg}$ sowie $\epsilon_0 = \epsilon_\infty = 0.01$. Daraus ergeben sich folgende Werte für die von uns betrachteten Temperaturen:

$$T_0 = \beta_0 \frac{\hbar\Omega}{k_B} \approx 39 \text{ K} \quad \text{und} \quad T_\infty = \beta_\infty \frac{\hbar\Omega}{k_B} \approx 483 \text{ K}.$$

Ohne die zusätzliche Näherung in (3.38) würde eine numerische Berechnung die Lösung $T_0 = 37,5 \text{ K}$ ergeben. Das Ergebnis wäre also um lediglich 4 % kleiner, was die Verwendung von (3.39) durchaus rechtfertigt. Die Existenz der Temperatur T_0 zeigt deutlich, dass selbst im Idealfall eines strikt eindimensionalen, homogenen atomaren Leiters die QWL nicht im gesamten Temperaturbereich zu finden ist. Sie bestimmt aber für Temperaturen $T < T_0$ in fundamentaler Weise das Verhalten der Wärmeleitfähigkeit.

3.4.2. Das heterogene Kontakt-Device-Kontakt-System

Wir wollen nun vom homogenen zum sehr viel allgemeineren heterogenen KDK-System übergehen, wie es in Abb. 3.1 zu sehen ist. Durch das beliebig geartete Device erwarten wir generell eine Reduzierung der thermischen Leitfähigkeit als Funktion der Temperatur, verursacht durch diverse Phononenstreuungen an Selbigem. Im Gegensatz zum homogenen KDK-System und aufgrund der Komplexität dieses Systems entzieht sich die Wärmeleitfähigkeit hier einer einfachen, auf dem gesamten Temperaturbereich gültigen, analytischen Darstellung. Der Fokus unserer Untersuchungen liegt jedoch auf den Tieftemperaturphänomenen, für welche wir die Wärmeleitfähigkeit analytisch durch (3.24) ausdrücken können:

$$\lambda(\beta) = \frac{\pi^2}{3} \Xi_0 \beta + \frac{2\pi^4}{15} \Xi_2 \Omega^2 \beta^3.$$

Im Folgenden wird sich zeigen, dass diese sehr kompakte Darstellung ausreichend ist, um die wichtigsten Eigenschaften zu untersuchen.

Aus Gl. (3.25) wissen wir, dass die QWL durch $(\pi^2/3)\beta$ gegeben ist. Vergleichen wir dieses Ergebnis mit dem Term führender Ordnung unserer obigen Entwicklung der Wärmeleitfähigkeit, so ist ersichtlich, dass die QWL im heterogenen KDK-System nur dann auftritt, wenn $\Xi_0 = 1$ ist. Um diese Bedingung zu erforschen, können wir auf die exakte Darstellung für Ξ_0 in Gl. (3.12) zurückgreifen, welche für ein beliebiges KDK-System Gültigkeit besitzt. Nach der Diskussion von Ξ_0 in Abs. 3.1 resultiert $\Xi_0 = 1$ nur dann, wenn

$$y = \frac{M_{C2} f_{C2}}{M_{C1} f_{C1}} = 1 \quad \Leftrightarrow \quad M_{C1} f_{C1} = M_{C2} f_{C2}. \quad (3.40)$$

gilt. In der Folge müssen also die Kontakte nicht identisch sein, sondern lediglich das Produkt aus Atommasse und Kopplungskonstante. Darüber hinaus gilt dies für alle Ketten unabhängig vom speziellen Streugebiet, weshalb es zusammen gesehen nicht ausgeschlossen ist, die QWL in komplett heterogenen KDK-Systemen zu beobachten. Für alle Systeme die diese Bedingung nicht erfüllen, ist die Wärmeleitfähigkeit um einen Faktor $\Xi_0 < 1$ unter ihren Quantenwert reduziert.

Für ein besseres Verständnis der grundlegenden Bedeutung und für eine physikalische Interpretation des Korrekturfaktors

$$\Xi_0 = \frac{4\sqrt{y}}{[1 + \sqrt{y}]^2}$$

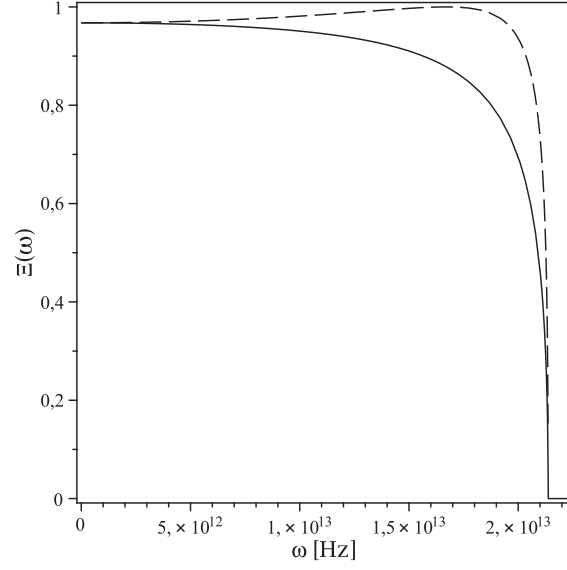


Abb. 3.3.: Transmissionen in einem SJ-System, bestehend aus Si und Ge nach der NEGF-Theorie (durchgezogene Linie) und nach der AMM-Theorie (gestrichelte Linie). Für kleine Frequenzen streben beide Funktionen gegen Ξ_0 . Parametrierung der Massen und Kopplungskonstanten nach [34].

betrachten wir das “Acoustic Mismatch Model” (AMM) [62]. Diese Tieftemperaturtheorie beschreibt den Transport von Phononen über eine SJ, welche das System in zwei Teile ($s = 1, 2$) unterschiedlichen Materials separiert. Die AMM-Transmission für die resultierende ebene Grenzfläche, senkrecht zur Transportrichtung ist gegeben durch $\Xi_{AMM}(\omega) = 4Z_1Z_2/(Z_1 + Z_2)^2$ mit $Z_s = \rho_s v_s(\omega)$, als die akustische Impedanz. Für unser eindimensionales Problem ist dabei $\rho_s = M_{Cs}/d_{Cs}$ die Längendichte und $v_s(\omega) = d\omega(k_s)/dk_s = (d_s \omega_s^{max}/2) \cos(k_s(\omega)d_s/2)$ die Gruppengeschwindigkeit im Material s .¹³ Beschränken wir uns auf tiefe Temperaturen und damit auf kleine für uns relevante Frequenzen gilt $v_s(\omega \rightarrow 0) = d_s \omega_s^{max}/2$, womit wir für die AMM-Transmission $\Xi_{AMM}(\omega \rightarrow 0) = \Xi_0$ erhalten (vgl. hierzu Abb. 3.3). Von diesem Ergebnis aus können wir schlussfolgern, dass sich bei tiefen Temperaturen das Transportproblem mit einem beliebigen Device verhält, wie ein SJ-Problem in dem die Kontakte direkt aneinander gekoppelt sind. Schließlich können wir die Bedingung für die QWL nun auch mit Hilfe der akustischen Impedanzen ausdrücken: $y = Z_2^2(\omega \rightarrow 0)/Z_1^2(\omega \rightarrow 0) = 1$. Es müssen

¹³Die von uns zu Grunde gelegte KDK-Struktur reduziert sich also in diesem Fall auf zwei direkt aneinander gekoppelte Kontaktketten, bestehend aus den Materialien s .

also die akustischen Impedanzen $Z_s > 0$ in beiden Materialien gleich sein. Verwendet man in der AMM-Theorie die Volumendichte, ist sie auch auf dreidimensionale Systeme anwendbar. Dieser Umstand liefert einen ersten Hinweis darauf, dass unter bestimmten Voraussetzungen die Bedingung $y = 1$ für jede akustische Mode in einer deutlich größeren Klasse von quasi-eindimensionalen 3D-Systemen erfüllt sein muss, um die QWL beobachten zu können. Diese Vermutung können wir mit den verallgemeinernden Ausführungen im Kap. 4 verifizieren.

Bei zunehmender Temperatur können wir anhand unserer Entwicklung der Wärmeleitfähigkeit (3.24) sehen, dass der Term führender Ordnung durch einen kubischen Term $\propto T^3$ korrigiert wird, welcher abhängig vom Entwicklungskoeffizienten Ξ_2 sowohl kleiner als auch größer als Null sein kann.¹⁴ Es wird deutlich, dass im Fall $\Xi_2 > 0$ ($\Xi_0 < 1$) eine geeignete Device-Region die Wärmeleitfähigkeit gegenüber einem SJ-System, in welchem die Kontakte direkt miteinander verbunden sind (AMM), verbessern kann. Dieses Phänomen ist in Analogie zu einer Entspiegelungsschicht in der Optik.¹⁵ Ein solcher Effekt ist im klassischen diffusiven Wärmetransport nicht denkbar, in dem eine zusätzliche Schicht auch immer einen zusätzlichen Wärmewiderstand bedeutet, der die Wärmeleitfähigkeit verringert. Bekommen wir hingegen die QWL ($\Xi_0 = 1$), dann gilt immer $\Xi_2 < 0$ und die Wärmeleitfähigkeit ist reduziert. In unserem Fall wird die Reduzierung bei steigenden Temperaturen durch die zunehmende Streuung der Phononen am Device verursacht. Aber auch in anderen heterogenen Nanosystemen konnte ein ähnliches Verhalten beobachtet werden. Dies ist auf unterschiedliche Streumechanismen zurück zu führen. Hierzu gehören beispielsweise Streuungen an geometrischen Substrukturen [38, 39], durch Oberflächenrauheit [40] oder an strukturellen Defekten [23]. Die Auswirkungen solcher Streuungen zeigen sich auch im Experiment [37].

Um die Präzision der Quantisierung der thermischen Leitfähigkeit zu bewerten, führen wir wieder das Verhältnis von Korrekturterm zum Term führender Ordnung auf Basis von Gl. (3.24) ein: $\epsilon = |(2\pi^4/15)\Xi_2\Omega^2\beta^3/(\pi^2/3)\Xi_0\beta|$. Damit können wir für eine gegebene Genauigkeit ϵ eine obere Grenztemperatur

$$T_\epsilon = \frac{\hbar}{\pi k_B} \sqrt{\epsilon \frac{5\Xi_0}{2|\Xi_2|}} \quad (3.41)$$

¹⁴Vergleiche hierzu z. B. Abb. 3.4 und 3.5 oder Abb. 7 in Ref. [45].

¹⁵Es ist üblich optische Instrumente zu entspiegeln (Vergütung). Dabei wird eine reflexionsmindernde Schicht auf die Gläser aufgebracht, welche den Lichtdurchgang durch das System Glas-Schicht-Luft, aufgrund der verbesserten Transmissionseigenschaften, erhöht.

festlegen. Sie gibt an, ab welcher Temperatur der Korrekturterm vernachlässigbar ist und somit die Quantisierung der Wärmeleitfähigkeit als dominanter Effekt in Erscheinung tritt. In der üblichen Darstellung der Wärmeleitfähigkeit $\Lambda(T)/T$ bildet sich für Temperaturen $T < T_\epsilon$ ein Plateau aus, so dass wir in diesem Sinne T_ϵ auch als die Plateauweite definieren können (vgl. hierzu Abb. 3.8).

Alles in Allem zeigen uns die Bedingungen (3.40) und (3.41), dass wir unter gewissen Voraussetzungen die QWL auch in komplett heterogenen Systemen beobachten können. Diese Ergebnisse lassen die QWL deutlich robuster erscheinen, als dies aus früheren Untersuchungen [28, 30, 37] zu erwarten war.

3.5. Anwendung auf ein eindimensionales Drei-Komponenten-System

Um unsere analytischen Ergebnisse im vorhergehenden Abschnitt zu illustrieren, betrachten wir nun eine DJ-Kette aus zwei homogenen Kontakten und einer dazwischen liegenden homogenen Device-Region.¹⁶ Wir setzen daher für die Device-Parameter $M_i = M_D$ und $f_i = f_D$ für $1 \leq i \leq N$. Zusätzlich schreiben wir vereinfachend in Gl. (3.2) $a_{2 \leq i \leq N-1}(\omega) := \omega^2 - 2\tilde{\omega}_0^2$ und $b_{1 \leq i \leq N-1} := \tilde{\omega}_0^2$ mit $\tilde{\omega}_0^2 := f_D/M_D$. In den Gln. (3.3) und (3.4) verwenden wir außerdem $f_1 = f_{N-1} := f_D$ sowie $M_1 = M_N := M_D$.

Ausgehend von diesen Setzungen werten wir die kompakte Stromtransmission (3.10) in Anh. A.5 analytisch aus und bekommen für $N \geq 3$

$$\Xi(\omega) = \frac{C\gamma_1(\omega)\gamma_2(\omega)}{|a_1 a_N n_{N-2} - \tilde{\omega}_0^4 [a_1 + a_N] n_{N-3} + \tilde{\omega}_0^8 n_{N-4}|^2}, \quad (3.42)$$

mit $n_{-1} := 0$, $n_0 := 1$ und

$$n_L(\omega) = \prod_{n=1}^L \left[\omega^2 - 4\tilde{\omega}_0^2 \sin^2 \left(\frac{n\pi}{2(L+1)} \right) \right]. \quad (3.43)$$

Wir haben hierbei die Frequenzabhängigkeit einiger Größen zu Gunsten einer übersichtlicheren Darstellung unterdrückt.

¹⁶Das betrachtete System wird also aus drei homogenen, im Allgemeinen unterschiedlichen Materialkomponenten gebildet.

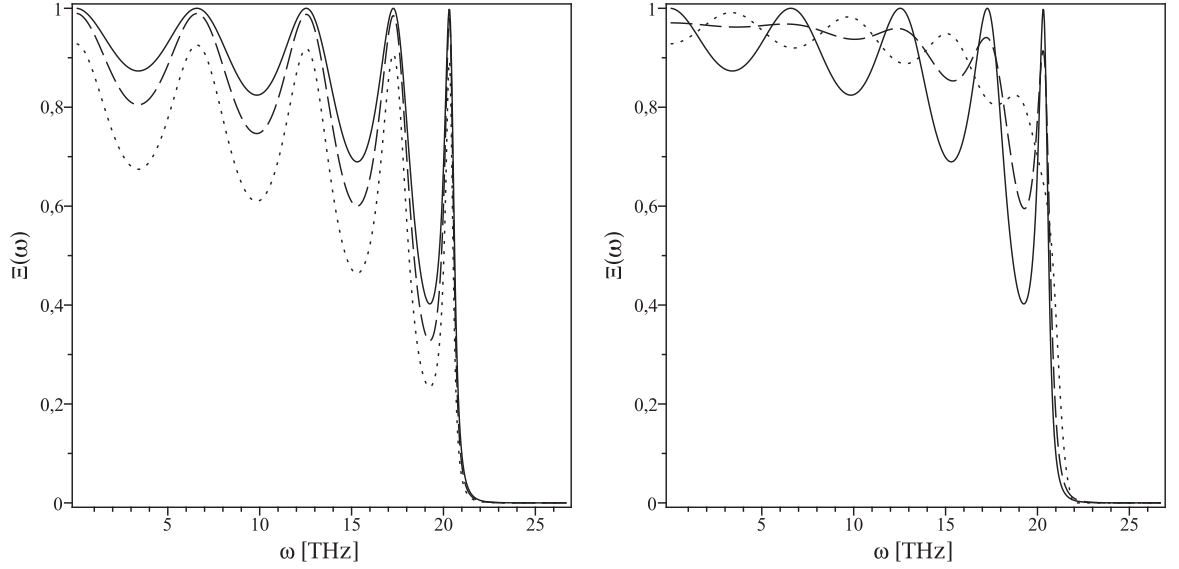


Abb. 3.4.: Stromtransmission nach Gl. (3.42) für eine Si-Ge-Si_X DJ-Struktur mit $N = 5$. Links: $M_X = M_{Si}$ (durchgezogen), $M_X = (2/3)M_{Si}$ (gestrichelt) und $M_X = (1/3)M_{Si}$ (gepunktet). Rechts: $M_X = M_{Si}$ (durchgezogen), $M_X = 2M_{Si}$ (gestrichelt) und $M_X = 3M_{Si}$ (gepunktet).

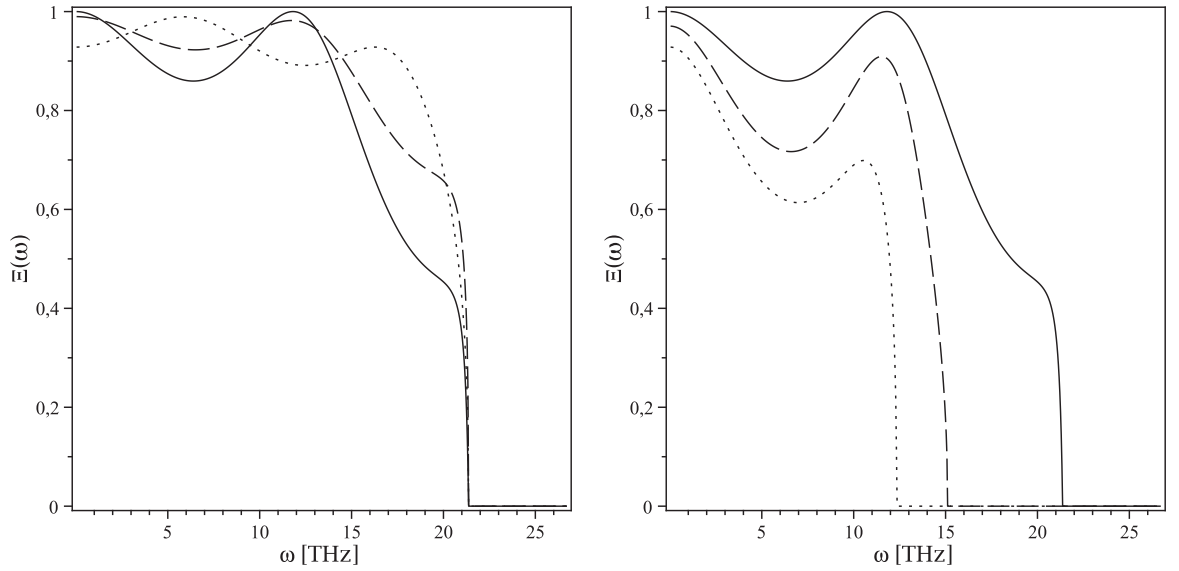


Abb. 3.5.: Stromtransmission nach Gl. (3.42) für eine Ge-Si-Ge_X DJ-Struktur mit $N = 5$. Links: $M_X = M_{Ge}$ (durchgezogen), $M_X = (2/3)M_{Ge}$ (gestrichelt) und $M_X = (1/3)M_{Ge}$ (gepunktet). Rechts: $M_X = M_{Ge}$ (durchgezogen), $M_X = 2M_{Ge}$ (gestrichelt) und $M_X = 3M_{Ge}$ (gepunktet).

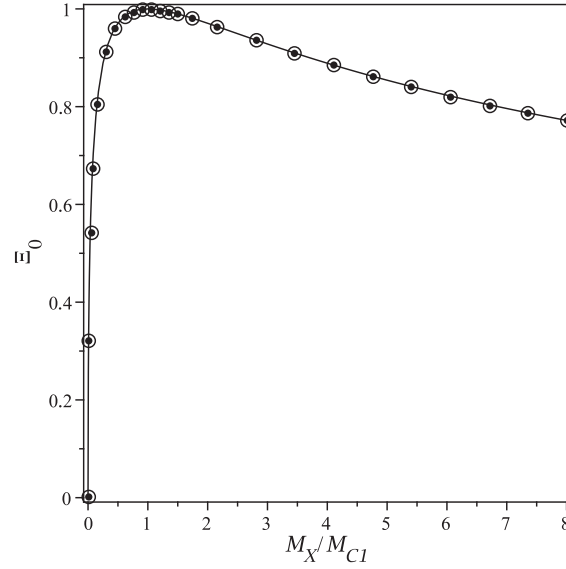


Abb. 3.6.: Darstellung von $\Xi(\omega \rightarrow 0) = \Xi_0$, als Funktion des Verhältnisses der Kontaktmassen $y = M_X/M_{C1}$. Punkte: Für eine Si-Ge-Si_X-Struktur mit einer Device-Region, bestehend aus fünf Ge-Atomen und einem Si-Kontakt. Kreise: Für eine Ge-Si-Ge_X-Struktur mit einer Device-Region, bestehend aus fünf Si-Atomen und einem Ge-Kontakt. Die Punkte und die Kreise sind nach (3.42) und die durchgezogene Linie nach dem universellen Resultat (3.12) berechnet.

Diese Formel wollen wir jetzt auf eine Si-Ge-Si_X-Struktur anwenden,¹⁷ welche aufgebaut ist aus einem Si-Kontakt, einem Device, bestehend aus fünf Ge-Atomen, sowie einem zweiten Kontakt aus einem fiktiven Typ von Isotopen Si_X. Die Isotope weisen die gleiche Kopplungsstärke wie in Si auf, haben jedoch eine abweichende Masse M_X . Die grafische Auswertung von (3.42) führt zu typischen Transmissionskurven und ist in Abb. 3.4 dargestellt. Zum Vergleich haben wir zusätzlich die Transmission für eine Ge-Si-Ge_X-Struktur in Abb. 3.5 dargestellt. In beiden Fällen ist gut zu sehen, dass $\Xi(\omega \rightarrow 0) = \Xi_0$ nicht immer gleich Eins ist. Es resultiert daraus und aus dem ersten Term $(\pi^2/3)\Xi_0\beta$ von Gl. (3.24) eine Abweichung von der QWL. Entsprechend Gl. (3.12) ist diese Abweichung allein abhängig von der Struktur der Kontakte, ausgedrückt durch den Parameter $y = M_{C1}f_{C1}/M_{C2}f_{C2}$. Um dieses Ergebnis zu demonstrieren, haben wir den Wert von $\Xi(\omega \rightarrow 0) = \Xi_0$ sowohl nach Gl. (3.42) als auch nach (3.12) für die von uns betrachteten atomaren Ketten berechnet und in Abb. 3.6 dargestellt. Wir finden eine

¹⁷Parametrierung der Massen und Kopplungskonstanten ebenfalls nach [34].

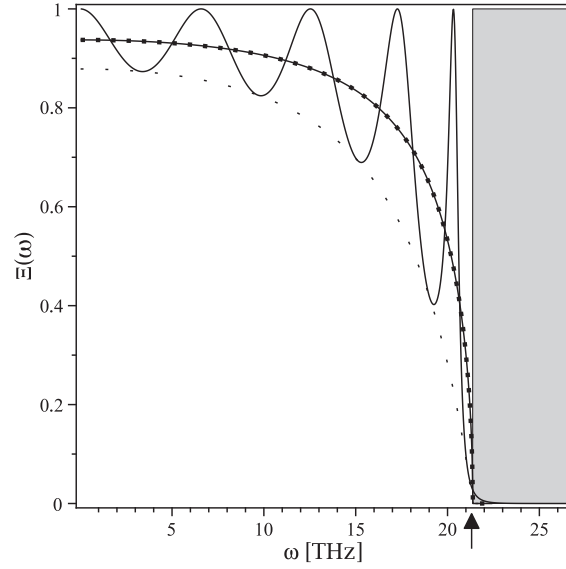


Abb. 3.7.: Transmission für eine Si-Ge-Si DJ-Struktur mit einer Device-Region, bestehend aus fünf Ge-Atomen (durchgezogen) sowie die gemittelte Transmission nach Gl. (3.44) (durchgezogene Linie mit Punkten). Die Peaks resultieren aus multiplen Reflexionen zwischen den zwei Grenzflächen des DJ-Systems. Die Minima der Transmission sind eingehüllt durch das Quadrat der gemittelten Transmissionsfunktion (gepunktet). Der Pfeil markiert die maximale Device-Frequenz $2\tilde{\omega}_0 = 21,4$ THz. In dem “verbotenen” grauen Bereich über $2\tilde{\omega}_0$ beobachten wir Phonontunneln, erkennbar als der kleine Schwanz in der Transmission.

vollständige Übereinstimmung für beide Kettentypen und alle von uns betrachteten Massenverhältnisse M_X/M_{C1} . Wie zu erwarten, ergibt sich nur für $M_X = M_{C1} \Leftrightarrow y = 1$ der Fall $\Xi_0 = 1$ und damit die universelle QWL, unabhängig vom Streubereich.

In Abb. 3.7 haben wir die NEGF-Transmission (3.42) für die Si-Ge-Si-Kette in Abb. 3.4 ($M_X = M_{Si}$) etwas tiefergehend analysiert. Im “erlaubten” Bereich für Frequenzen unterhalb der maximalen Device-Frequenz von $2\tilde{\omega}_0 = 21.4$ THz (Pfeil) finden wir vollständige Übereinstimmung mit den Ergebnissen in Ref. [41]. Durch diesen Vergleich wird klar, dass die Transmissionspeaks ein Interferenzphänomen sind, dass durch die multiplen Reflexionen der Phononenwellen zwischen den zwei Grenzflächen entsteht.¹⁸ Der Effekt des Phonontunnelns, welcher unter den entsprechenden Voraussetzungen mög-

¹⁸Diese Vorgänge sind analog zum Fabry-Pérot-Interferometer.

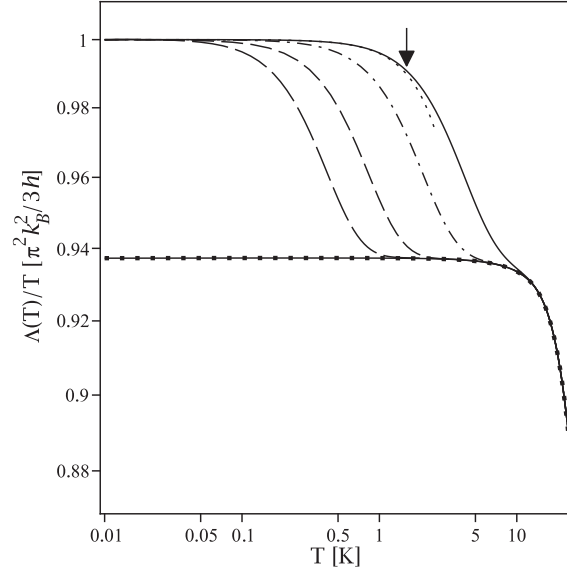


Abb. 3.8.: Wärmeleitfähigkeit $\Lambda(T)$ geteilt durch T für eine Si-Ge-Si DJ-Struktur mit einer Device-Region, bestehend aus 5 (durchgezogen), 10 (gestrichpunktet), 25 (gestrichelt) und 50 (lang gestrichelt) Ge-Atomen. Das obere Plateau repräsentiert die QWL. Darüber hinaus sehen wir die Entstehung eines zweiten Plateaus für wachsendes N mit dem Wert (3.45). Die gepunktete Linie stellt die Entwicklung nach Gl. (3.24) für ein Device aus fünf Atomen dar. Der Pfeil markiert die Plateauweite $T_\epsilon = 1,6$ K für $\epsilon = 0,01$. Alle Kurven für die verschiedenen N vereinigen sich in einer Asymptote (durchgezogene Linie mit Punkten), die durch $\Lambda_{av}(T)/T$ gegeben ist.

lich¹⁹ und als der kleine Schwanz im “verbotenen” grauen Bereich zu sehen ist, wurde in Ref. [41] nicht diskutiert. Ungeachtet dessen ist für ausreichend lange Device-Regionen der Tunneleffekt vernachlässigbar und wir können Gl. (16) aus Ref. [41] benutzen, um in naheliegender Weise (vgl. Ref. [20, S. 199]) einen über die Phasen gemittelten Ausdruck

$$\Xi_{av}(\omega) = \frac{\Xi_{SG}^2(\omega)}{1 - [1 - \Xi_{SG}(\omega)]^2} \quad (3.44)$$

für die Transmission zu gewinnen. Der Verlauf dieser Kurve ist in Abb. 3.7 als die durchgezogene Linie mit Punkten gezeigt. In Gl. (3.44) ist $\Xi_{SG}(\omega)$ die Transmission eines SJ-Systems, bestehend aus Si und Ge, die sich z. B. leicht nach Gl. (3.42) durch

¹⁹Tunneln ist in Systemen möglich, in denen die maximale Device-Frequenz kleiner ist, als die beiden Maximalfrequenzen in den Kontakten. Andernfalls ist das Tunneln der Phononen grundsätzlich nicht möglich (vgl. hierzu die Abbn. 3.4 und 3.5).

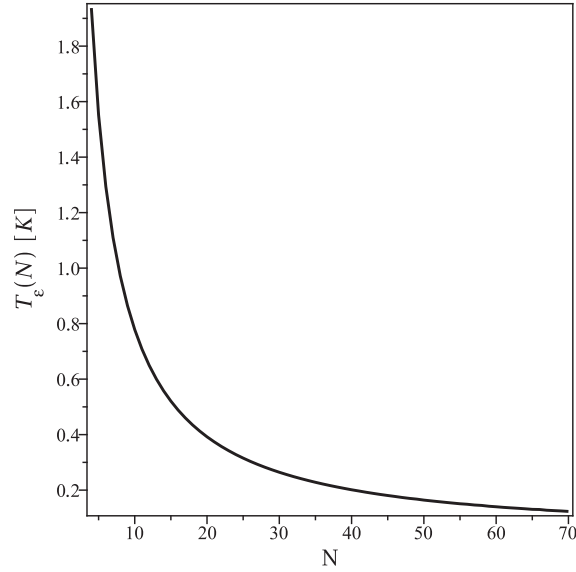


Abb. 3.9.: Die Plateauweite T_ϵ der Si-Ge-Si DJ-Struktur in Abb. 3.8, als Funktion der Device-Länge N . Wir haben $\epsilon = 0,01$ gewählt, entsprechend einer maximal einprozentigen Abweichung der Wärmeleitfähigkeit vom Quantenwert.

Betrachtung einer Si-Ge-Ge-Struktur für $N = 3$ berechnen lässt.

Zum Schluss wollen wir die Gesamtwärmeleitfähigkeit nach den Gln. (3.20) und (3.42) für eine Reihe von Si-Ge-Si-Ketten verschiedener Device-Längen (5, 10, 25, 50 Atome) berechnen. In Abb. 3.8 finden wir die Ergebnisse in der typischen Darstellung $\Lambda(T)/T$. Da in diesen Systemen $y = 1$ ist, können wir für Temperaturen $T < T_\epsilon$ ein Plateau beim Wert $\pi^2 k_B^2 / 3h$ beobachten, welches der QWL entspricht. Die Weite T_ϵ dieses Plateaus ist gegeben durch Gl. (3.41). Für das fünfatomige Device und $\epsilon = 0.01$ (entsprechend einer Abweichung vom Quantenwert von 1 %) ist die Plateauweite in Abb. 3.8 durch den Pfeil markiert. Für steigende Temperaturen gewinnt der Term dritter Ordnung in der Entwicklung (3.24) an Einfluss und die Kurve $\Lambda(T)/T$ fällt unter ihren Plateauwert. Dieses Verhalten ist wiederum sensibel von der Zahl N der Atome im Device abhängig. Aus diesem Grund haben wir in Abb. 3.9 die Plateauweite T_ϵ als Funktion der Device-Länge aufgetragen. Für weiter steigende Temperaturen, jenseits des Gültigkeitsbereichs unserer Entwicklung bis zur dritten Ordnung, verschmelzen die Kurven für die verschiedenen N in einer einzigen asymptotischen Kurve. Diese Asymptote entspricht der phasengemittelten Wärmeleitfähigkeit $\Lambda_{av}(T)$, die wir aus der gemittelten Transmission in Gl. (3.44)

ableiten können. Sie bildet ein zweites, tieferes Plateau mit dem Wert

$$\frac{\Xi_{0,SG}^2}{1 - (1 - \Xi_{0,SG})^2} \frac{\pi^2 k_B^2}{3h}. \quad (3.45)$$

Diesen bekommen wir aus (3.20) und (3.44) für $\Xi_{SG}(\omega \rightarrow 0) = \Xi_{0,SG}$, wobei $\Xi_{0,SG}$ durch (3.12) gegeben ist. Für Temperaturen größer als die Plateauweite des tieferen Plateaus beginnen die Kurven $\Lambda(T)/T$ mit identischem Verlauf erneut zu fallen. Die beschriebene Konvergenz der Wärmleitfähigkeit gegen den phasengemittelten Wert für zunehmende Temperaturen bietet eine natürliche Erklärung für die Unabhängigkeit von $\Lambda(T)$ von der Zahl N der Atome im Device, welche auch in numerischen Berechnungen [12, 34, 63] gefunden wurde.

4. Quantisierte Wärmeleitung in dreidimensionalen Strukturen

Die nachfolgende Theorie verallgemeinert unter strikten Voraussetzungen die Ergebnisse der vorangegangenen Abschnitte auf dreidimensionale, realistischere Systeme. Hierbei eröffnet sich ein umfangreiches Forschungsgebiet, welches zu diesem Zeitpunkt keinesfalls abgeschlossen ist. In der folgenden Darstellung werden die theoretischen Grundlagen entwickelt, die ein qualitatives und in Teilen auch quantitatives Verständnis des Tieftemperaturtransports von Phononen in einer ganzen Klasse von dreidimensionalen, heterogenen Nanostrukturen ermöglicht. Die daraus resultierenden Erkenntnisse stimmen dabei mit den experimentellen Beobachtungen überein.

4.1. Effektive Kristallstruktur für akustische Phononen

Wir wollen den in Abb. 4.1 schematisch dargestellten homogenen Kristall bezüglich ganz bestimmter langwelliger Phononenmoden untersuchen. Man findet diese für spezielle Auslenkungen der Atome im Kristall. Dabei schwingen alle Atome ausschließlich in eine der drei Koordinatenrichtungen $j = x, y, z$, wobei die Schwingungsamplituden für aneinandergrenzende Einheitszellen (EZ) nur wenig variieren und innerhalb einer EZ alle Atome gleich ausgelenkt sind. Durch letzteren Umstand kann man sich die Atome einer EZ als starr verbunden vorstellen (kleine “Hanteln” in Abb. 4.1). In jeder EZ ist es dann möglich die Massen m_1 und m_2 der Atome in ihrem Schwerpunkt zu vereinigen und nur die interatomaren Kopplungen zwischen benachbarten EZ zu betrachten, für welche wir eine äquivalente, effektive Kopplung einführen. Im Fall dieser langwelligen Phononen reduziert sich der Kristall also effektiv auf ein orthorhombisches Kristallsystem, mit fiktiven Atomen der Masse $M = m_1 + m_2$ im Schwerpunkt der ursprünglichen EZ sowie Kopplungen und Gitterkonstanten, die für jede der drei Raumrichtungen verschieden

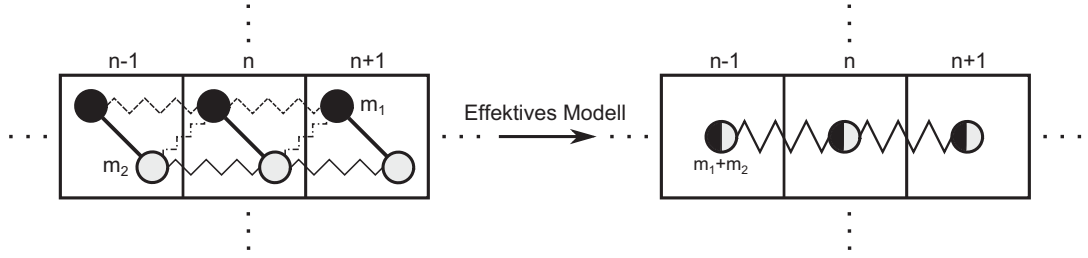


Abb. 4.1.: Schematische Darstellung eines Kristalls und seiner EZ, welcher sich aufgrund der speziellen Eigenschaften der langwelligen Phononen in einen effektiven Kristall transformieren lässt.

sein können. Für eine tiefer gehende Diskussion verweisen wir auf den Kontinuumsliches für ein allgemeines Kristallsystem [64, S. 134 ff.] bzw. [6, S. 70 ff.]. Dieser erweist sich in der Regel als zweckmäßige Näherung für elastische Wellen mit Wellenlängen größer als 10^8 m bzw. Schwingungsfrequenzen unterhalb von 10^{11} bis 10^{12} Hz [5].

Als ein Beispiel wollen wir die Ausbreitung von Gitterwellen in Richtungen hoher Kristallsymmetrie betrachten. In einem Kristall in NNWw und zweiatomiger Basis existieren dann Kristallrichtungen, in denen sich ganze Netzebenen parallel bzw. senkrecht zur Flächennormalen gegeneinander bewegen können (vgl. z. B. [5, S. 89–128], [65, S. 64–73] und [59, S. 178–183]). In den aufeinander folgenden Netzebenen alternieren die Atomsorten und haben dabei den Abstand $d/2$, die Massen m_1 sowie m_2 und sind durch gleichartige Federn mit der Federkonstante f verbunden.¹ Die Länge der EZ und damit die Periodizitätslänge ist aufgrund der zweiatomigen Basis d . Nach den Refn. [59, S. 180] und [65, S. 64–73] liefert dann die Dispersionsrelation zwei Äste, in der die akustischen Phononen beschrieben werden durch:

$$\omega^2 = f \left(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} \right) - f \sqrt{\left(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} \right)^2 - \frac{4}{m_1 m_2} \sin^2 \left(\frac{kd}{2} \right)}. \quad (4.1)$$

Im Limes großer Wellenlängen, also für $kd \ll 1$, erhalten wir aus (4.1) die für akustische Phononen typische lineare Dispersion

$$\omega^2 = \frac{2f}{m_1 + m_2} \frac{d^2 k^2}{4}. \quad (4.2)$$

¹Als ein Beispiel kann hier ein Natriumchloridkristall gesehen werden, in dem sich die Wellen entlang der [111]-Richtung ausbreiten sollen.

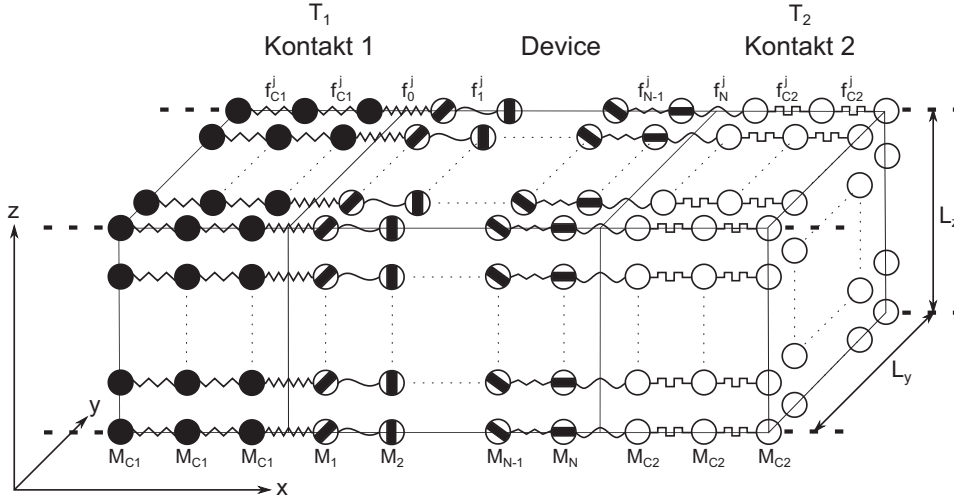


Abb. 4.2.: Schematische Darstellung eines dreidimensionalen Kristalls im Rahmen des Kontinuumsmodells. Die Kugeln symbolisieren die im Schwerpunkt vereinigten Massen der Atome in einer EZ. Sie wechselwirken über effektive Kopplungen, wobei auf die Darstellung der lateralen Kopplungen der Übersichtlichkeit halber verzichtet wurde. Das Device besteht aus einer epitaktischen Schichtung beliebiger Atome und ist an homogene, nicht unbedingt identische Kontakte gekoppelt.

Im transformierten Kristall finden wir nur noch ein Atom mit der Masse $m_1 + m_2$ im Schwerpunkt der EZ, wodurch sich die Gitterkonstante auf d verdoppelt. Ebenfalls nach den Refn. [65, S. 64–73] und [59, S. 174] gilt dann für die Dispersion

$$\omega^2 = \frac{4f'}{m_1 + m_2} \sin^2 \left(\frac{kd}{2} \right) \approx \frac{2f}{m_1 + m_2} \frac{d^2 k^2}{4} \quad \text{für } kd \ll 1. \quad (4.3)$$

Da wir die Federlänge verdoppeln mussten und die Federkonstante einer Feder proportional zur Zahl der Windungen ist (lange Federn sind weicher), haben wir $f' = f/2$ gesetzt. Dieser Schritt entspricht der Einführung einer effektiven Kopplung, welche sich im Rahmen des zu Grunde liegenden Federmodells sehr anschaulich begründen lässt. Der Vergleich von (4.2) und (4.3) zeigt, dass der transformierte Kristall eine äquivalente Darstellung der Dispersion für langwellige akustische Phononen ergibt.

Überträgt man die vorangegangenen Überlegungen, ist es möglich eine Vielzahl (stückweise) homogener Kristallsysteme entsprechend zu transformieren. Zur Vereinfachung wollen wir uns hier auf orthorhombische, eventuell nicht primitive EZ beschränken.²

²Es sind auch andere EZ-Typen denkbar, in denen sich durch die beschriebene Kristalltransformation

Angewandt auf die häufig diskutierten KDK-Systeme, lässt sich die in Abb. 4.2 gezeigte effektive Struktur konstruieren. Jede Kugel stellt hierbei die effektive Masse im Schwerpunkt der orthorhombischen EZ dar. Die Transportrichtung sei x , in welcher der Kristall unendlich ausgedehnt ist. In y - und z -Richtung ist der Kristall endlich mit $y \in [0, L_y]$ und $z \in [0, L_z]$. Das Device sei durch eine (epitaktische) Schichtung verschiedener homogener Materialien aufgebaut, von welchen wir hier erst einmal verlangen wollen, dass sie ein zu den Kontakten passendes orthorhombisches Kristallsystem bilden (siehe Abb. 4.2). Ein hervorragender Vertreter, aufgrund der nahezu identischen Gitterkonstanten (vgl. Tab. 4.1), ist ein epitaktisches System bestehend aus GaAs und AlAs, in dem die Kontakte aus einem Material und das Device aus einer Schichtung dieser Materialien besteht. Es sind weitere versetzungsfreie, epitaktische Systeme auch für stärker abweichende Gitterkonstanten möglich, solange sie eine kritische Schichtdicke nicht überschreiten.³ In diesem Fall passt das aufwachsende Material seine Gitterkonstante durch Verspannung an die Gitterkonstante des Wirtsmaterials an. In der resultierenden Struktur in Abb. 4.2 können wir nun mit l nummerierte Ebenen senkrecht zur Transportrichtung x definieren, in der ausschließlich effektive Atome der Masse M_l zu finden sind. Hierbei erstreckt sich das Device über die Indizes $1 \leq l \leq N$. Die beiden Kontakte $s = 1$ für $l < 1$ und $s = 2$ für $l > N$ sind wieder homogen, aber nicht unbedingt identisch und fungieren als thermodynamische Reservoirs mit den konstanten Temperaturen T_s . Im nächsten Abschnitt werden wir zeigen, dass bei tiefen Temperaturen nur die Kopplungen f_l^j zwischen den Massen M_l und M_{l+1} entlang der x -Richtung von Bedeutung sind. Der Übersichtlichkeit halber verzichten wir daher auf die Darstellung der lateralen Kopplungen. Die spezielle Wahl der Darstellung ist eine Vorwegnahme und soll die quasi-eindimensionale Natur des betrachteten Transportproblems verdeutlichen, die wir im anschließenden Abschnitt herausarbeiten werden.

eine durchgehende Netzebenenstruktur senkrecht zur betrachteten Transportrichtung herausbildet.

³Für eine Einführung in dieses Thema, welches wir hier nicht weiter vertiefen wollen, vgl. z. B. [66] und die Literatur darin.

4.2. Dynamik des effektiven Kristalls und die quantisierte Wärmeleitfähigkeit

In einem epitaktisch geschichteten Kristall, mit der im vorangegangenen Abschnitt beschriebenen Struktur, betrachten wir den Fall, in dem sich alle Atome ausschließlich in eine der drei Raumrichtungen $j = x, y, z$ bewegen. Wir interessieren uns für die Bewegungsgleichung einer Masse M_l in der Atomschicht l senkrecht zur Transportrichtung x . Aufgrund der orthorhombischen, geschichteten Struktur und der vorausgesetzten NNWw wirkt auf das Atom mit dem Ortsindex (l, m, n) im Falle einer Auslenkung $\Psi_{l,m,n}^j(t) := \Psi^j(x_l, y_m, z_n, t) \neq 0$ in Richtung von j eine Rückstellkraft entlang von j , die sich aus drei Einzelkräften F_l^j , F_{lm}^j sowie F_{ln}^j zusammensetzt. Diese Kräfte werden durch die Kopplungen entlang der Indizes l , m und n verursacht (vgl. hierzu Abb. 4.3) und sind gegeben durch⁴

$$\begin{aligned} F_l^j &= f_{l-1}^j[\Psi_{l-1,m,n}^j(t) - \Psi_{l,m,n}^j(t)] + f_l^j[\Psi_{l+1,m,n}^j(t) - \Psi_{l,m,n}^j(t)], \\ F_{lm}^j &= f_{lm}^j[\Psi_{l,m-1,n}^j(t) - \Psi_{l,m,n}^j(t)] + f_{lm}^j[\Psi_{l,m+1,n}^j(t) - \Psi_{l,m,n}^j(t)], \\ F_{ln}^j &= f_{ln}^j[\Psi_{l,m,n-1}^j(t) - \Psi_{l,m,n}^j(t)] + f_{ln}^j[\Psi_{l,m,n+1}^j(t) - \Psi_{l,m,n}^j(t)]. \end{aligned}$$

Der Parameter f_l^j beschreibt die Kopplungsstärke, die durch eine Auslenkung in j -Richtung ($j = x, y, z$) durch die Kopplungen entlang des Indexes l hervorgerufen wird. Die Auslenkung kann dabei senkrecht oder parallel zu l sein. Im ersteren Fall wollen wir von Scherkopplungen, im letzteren Fall von Längskopplungen sprechen.⁵ Die Parameter f_{lm}^j und f_{ln}^j beschreiben die Kopplungen in der homogenen Atomschicht l entlang der m - bzw. n -Richtung, wenn die Atome in Richtung von j ausgelenkt werden. Auch hier ergeben sich in Abhängigkeit von j Scher- oder Längskopplungen. Im Allgemeinen sind diese zwei Arten der Kopplung nicht gleich. Die Gesamtkraft auf das Atom (l, m, n) ist durch die Summe der obigen drei Kräfte gegeben. Die Bewegungsgleichung für dieses

⁴Wir machen an dieser Stelle den für kleine Auslenkungen (harmonische Näherung) üblichen Ansatz, dass die Kräfte proportional zur Differenz der Auslenkungen benachbarter Atome sind (vgl. z. B. [65, S. 64–73] und [59, S. 173]).

⁵Exemplarisch bedeutet dies, wenn wir ein Atom entlang der x -Richtung auslenken, so erzeugen die mit l indizierten Kopplungen eine Längskopplung. Wohingegen Auslenkungen in y - oder z -Richtung für die gleichen Kopplungen zu Scherkopplungen führen.

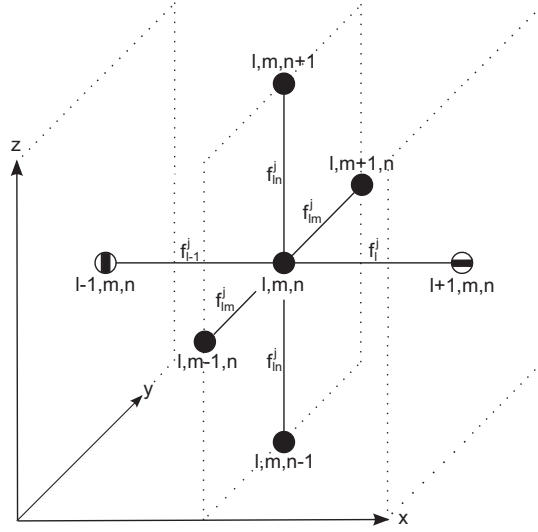


Abb. 4.3.: Schematische Darstellung der Kopplungsverhältnisse im orthorhombischen Kristall. Die Kugeln symbolisieren die im Schwerpunkt vereinigten Massen der Atome in einer EZ, welche über die effektiven Kopplungen f_l^j , f_m^j und f_n^j wechselwirken.

Atom lautet damit⁶

$$\begin{aligned}
 M_l \ddot{\Psi}_{l,m,n}^j(t) = & f_{l-1}^j \Psi_{l-1,m,n}^j(t) - [f_{l-1}^j + f_l^j] \Psi_{l,m,n}^j(t) + f_l^j \Psi_{l+1,m,n}^j(t) \\
 & + f_{lm}^j \Psi_{l,m-1,n}^j(t) - 2f_{lm}^j \Psi_{l,m,n}^j(t) + f_{lm}^j \Psi_{l,m+1,n}^j(t) \\
 & + f_{ln}^j \Psi_{l,m,n-1}^j(t) - 2f_{ln}^j \Psi_{l,m,n}^j(t) + f_{ln}^j \Psi_{l,m,n+1}^j(t).
 \end{aligned} \tag{4.4}$$

Wir wollen nun dieses Problem behandeln, indem wir das gesuchte Auslenkungsfeld $\Psi_{l,m,n}^j(t)$ nach den Transversalmode $\Phi_{l,p}^j(md)$ und $\Phi_{l,q}^j(md)$ entwickeln.⁷ Diese beschreiben die unabhängigen Schwingungen in jeder Schicht l , senkrecht zur Transportrichtung, entlang der Koordinaten $y = md$ und $z = nd$, die entsprechend dem äquidistanten Gitter mit der Gitterkonstante d diskretisiert werden können. Aufgrund der Translationsinvarianz in transversaler Richtung, können wir für die Transversalmode ebene Wellen

⁶Unter der Voraussetzung tiefer Temperaturen und für ein homogenes Medium lässt sich zeigen, dass diese Gleichung äquivalent zur diskretisierten Wellengleichung der Kontinuumsmechanik von Festkörpern ist.

⁷Die Entwicklung ist aus mathematischer Sicht letztlich vollkommen analog zur Fourierentwicklung einer Funktion in mehreren Veränderlichen. Wir wählen jedoch diesen Weg, da er der physikalischen Anschauung angepasst ist und wir auf diese Weise eine Reihe wichtiger physikalischer Begriffe abhandeln können.

verwenden. Dieser Wellenansatz muss dabei in transversaler Richtung die gegebenen Randbedingungen (RB) erfüllen. Wir gehen hier von losen RB aus, bei denen die Atome am Rand frei schwingen können. In diesem Fall muss für den Ansatz an den Stellen $y = 0$, $z = 0$, $y = L_y$ und $z = L_z$ gelten:

$$\left. \frac{d\Phi_{l,p}^j(md)}{d(md)} \right|_{y=0} = \left. \frac{d\Phi_{l,p}^j(md)}{d(md)} \right|_{y=L_y} = \left. \frac{d\Phi_{l,q}^j(nd)}{d(nd)} \right|_{z=0} = \left. \frac{d\Phi_{l,q}^j(nd)}{d(nd)} \right|_{z=L_z} = 0. \quad (4.5)$$

Die Transversalmoden haben dann die im Appendix A.6 abgeleitete Gestalt:

$$\begin{aligned} \Phi_{l,p}^j(md) &= 2C_{l,p}^j \cos\left(\frac{p\pi}{L_y}md\right), \\ \Phi_{l,q}^j(nd) &= 2C_{l,q}^j \cos\left(\frac{q\pi}{L_z}nd\right), \end{aligned} \quad (4.6)$$

wobei $k_p = p\pi/L_y$ und $k_q = q\pi/L_z$ die Wellenzahlen der jeweiligen Moden sind. Für diese Wellen mit Amplitude $C_{l,p/q}^j$ führen die Atome am Rand die gewünschten harmonischen Schwingungen aus, denn es gilt z. B. für $y = L_y$:

$$\Phi_p^j(L_y, t) = 2(-1)^p C_{l,p}^j e^{-i\omega t}. \quad (4.7)$$

Die Transversalmoden bilden für die jeweilige Richtung ein vollständiges Orthonormalsystem (VONS) nachdem wir die Lösung $\Psi_{l,m,n}^j(t)$ entwickeln können. Wir setzen dazu⁸

$$\Psi^j(x_l, md, nd, t) = \Psi_{l,m,n}^j(t) = \sum_{p,q=0}^{\infty} \psi_{l,pq}^j \cos\left(\frac{p\pi}{L_y}md\right) \cos\left(\frac{q\pi}{L_z}nd\right) e^{-i\omega t}. \quad (4.8)$$

Die Entwicklungskoeffizienten $\psi_{l,pq}^j := \psi_{pq}^j(x_l)$ hängen dabei noch von den nicht unbedingt äquidistanten Orten x_l entlang der x -Achse ab. Das Einsetzen von (4.8) in (4.4) liefert dann

$$M_l \omega^2 \psi_{l,pq}^j = f_{l-1}^j \psi_{l-1,pq}^j - [f_{l-1}^j + f_{lm}^j (k_p d)^2 + f_{ln}^j (k_q d)^2 + f_l^j] \psi_{l,pq}^j + f_l^j \psi_{l+1,pq}^j. \quad (4.9)$$

In dieser Eigenwertgleichung mit EW ω^2 haben wir vom Limes großer Wellenlängen ($k_p/qd \ll 1$) Gebrauch gemacht. Sie beschreibt den Zusammenhang zwischen den Ent-

⁸Diese Setzung entspricht exakt der Fourierentwicklung von $\Psi_{l,m,n}^j(t)$ unter der Maßgabe, dass diese Funktion die RB (4.5) erfüllt.

wicklungskoeffizienten $\psi_{l,pq}^j$ an den Stellen x_l und zeigt zudem, dass keine “Mode Mixing”-Effekte⁹ auftreten. Wir wollen Gl. (4.9) zunächst für die Kontaktregionen $s = 1, 2$ untersuchen. Aufgrund der Homogenität der Kontakte gilt $f_{l-1}^j = f_l^j := f_{Cs}^j$, $M_l := M_{Cs}$ sowie für die Gitterkonstante in x -Richtung $d_x = d_s$. Wir definieren für $s = 1$ die Kontaktkoordinate $x_l = ld_1$ mit $l < 1$ und für $s = 2$ die Koordinate $x_l = ld_2$ mit $l > N$, so dass wir auch hier als Lösungen in x -Richtung ebene Wellen ansetzen können:¹⁰

$$\psi_{l,pq}^j = A_{s,pq}^j e^{ik_{s,pq}ld_s} + B_{s,pq}^j e^{-ik_{s,pq}ld_s}. \quad (4.10)$$

Setzen wir diesen Ansatz in die Gl. (4.9) ein, erhalten wir in den Kontakten die nachstehende Bewegungsgleichung:

$$M_{Cs}\omega^2\psi_{l,pq}^j = [f_{Cs}^j(k_{s,pq}d_s)^2 + f_{lm}^j(k_p d)^2 + f_{ln}^j(k_q d)^2]\psi_{l,pq}^j. \quad (4.11)$$

Offensichtlich ist $\psi_{l,pq}^j$ genau dann eine Lösung von (4.9), wenn für ω^2 gilt:

$$\omega(\vec{k}_{pq}^s)^2 = (v_{xs}^j k_{s,pq})^2 + \left(v_{ys}^j \frac{p\pi}{L_y}\right)^2 + \left(v_{zs}^j \frac{q\pi}{L_z}\right)^2. \quad (4.12)$$

Dies ist die Dispersionsrelation¹¹ mit $k_{pq}^s = |\vec{k}_{pq}^s| = \sqrt{(k_{s,pq})^2 + (k_p)^2 + (k_q)^2}$ und den Schallgeschwindigkeiten $v_{xs}^j = \sqrt{f_{Cs}^j/M_{Cs}d_s}$ und $v_{(y/z)s}^j = \sqrt{f_{l(m/n)}^j/M_{Cs}d}$ im Limes großer Wellenlängen. Aufgrund der semiinfiniten Ausdehnung der Kontakte in Richtung von x , können wir die Wellenzahl $k_{s,pq}$ praktisch als kontinuierliche Größe ansehen. Wir wollen uns nun auf den wichtigen Spezialfall $p, q = 0$ konzentrieren. Dessen Wellen entsprechen den akustischen Phononen, da nur für $p, q = 0$ die Dispersion (4.12) linear gegen Null geht, für $\vec{k}_{pq}^s \rightarrow 0$. Nach Gl. (4.8) führt dies zu Wellen der Form

$$\Psi_{l,m,n}^j(t) = \Psi_l^j(t) = [A_{s,00}^j e^{ik_{s,00}ld_s} + B_{s,00}^j e^{-ik_{s,00}ld_s}] e^{-i\omega t}. \quad (4.13)$$

⁹Es gibt keine Kopplungen zwischen einer Mode mit Index p bzw. q und Moden, die einen höheren oder niedrigeren Index haben.

¹⁰Durch die heterogene Struktur (variierte Massen, Kopplungen und Gitterkonstanten) des Devices in Transportrichtung, ist die globale Definition von ebenen Wellen als Lösungsansatz in Richtung von x nicht machbar.

¹¹Verzichten wir auf den für uns relevanten Limes sehr großer Wellenlängen bzw. sehr kleiner Frequenzen, so lautet die Dispersionsrelation für die Wellen in den Kontaktregionen $\omega(\vec{k}_{pq}^s)^2 = (2/M_{Cs}) \left\{ f_{Cs}^j [1 - \cos(k_{s,pq}d_s)] + f_{lm}^j [1 - \cos(k_p d)] + f_{ln}^j [1 - \cos(k_q d)] \right\}$.

Mit den Setzungen $k_s := k_{s,00}$, $A_s^j := A_{s,00}^j$ sowie $B_s^j := B_{s,00}^j$ lässt sich dieser Ausdruck noch etwas vereinfachen zu

$$\Psi_{l,m,n}^j(t) = \Psi_l^j(t) = \left[A_s^j e^{ik_s l d_s} + B_s^j e^{-ik_s l d_s} \right] e^{-i\omega t}. \quad (4.14)$$

Die akustischen Moden (4.14) breiten sich also exakt entlang der x -Achse und damit entlang der Transportrichtung aus und sind dabei in Abhängigkeit von $j = x, y, z$ in der longitudinalen Richtung oder in den zwei transversalen Richtungen polarisiert. Die Forderung $p, q = 0$ muss auch für die Gesamtlösung und damit für Gl. (4.9) verlangt werden. Wir erhalten dann mit der Definition $\psi_{l,00}^j := \psi_l^j$ die überall gültige Bewegungsgleichung der akustischen Phononen:

$$M_l \omega^2 \psi_l^j = f_{l-1}^j \psi_{l-1}^j - [f_{l-1}^j + f_l^j] \psi_l^j + f_l^j \psi_{l+1}^j. \quad (4.15)$$

Diese Gleichung beschreibt die Schwingung ganzer, senkrecht zur x -Achse orientierter Netzebenen mit den Koordinaten $x = x_l$. Möglich sind hierbei nach (4.14) kollektive Schwingungen in longitudinaler und den zwei transversalen Richtungen.¹² Für diese drei Polarisierungen sind noch die effektive Längskopplung f_l^x sowie die zwei entsprechenden effektiven Scherkopplungen f_l^y und f_l^z zu bestimmen (vgl. Abs. 4.4). Die Reduzierung auf eine Bewegung starrer Netzebenen ist letztlich auch der Grund dafür, dass die transversalen Kopplungen f_{lm}^j und f_{ln}^j keine Rolle spielen, weshalb wir auf deren Darstellung in Abb. 4.2 verzichtet haben. Überführen wir die Gl. (4.15) in ihre Matrixdarstellung und benutzen die Transformation $\psi_l = (1/\sqrt{M_l}) \tilde{\psi}_l \exp(-i\omega t)$ ist es uns möglich, die dynamische Matrix der akustischen Wellen zu konstruieren. Diese infinite, reelle und

¹²Wir wollen hier darauf hinweisen, dass noch eine vierte Schwingungsmode möglich ist. Bei dieser Torsionsmode verdrehen sich die einzelnen Netzebenen gegeneinander. Zu Gunsten einer einfacheren mathematischen Darstellung und einer leichteren Parametrisierung der betrachteten Systeme verzichten wir in dieser Arbeit auf die Behandlung dieser Schwingungsmode. Die Eigenschaften dieser Mode bzgl. des Tieftemperatur-Wärmetransports entsprechen den Eigenschaften der übrigen akustischen Moden (vgl. hierzu z. B. [37]). Zudem sei bemerkt, dass in realen endlichen Systemen diese Moden über die Systemoberfläche koppeln. Die hier betrachteten reinen Schwingungsmoden werden dann zu einer Dilatations-, zwei Biege- und einer Torsionsschwingung. Zur Vereinfachung folgen wir der Argumentation in [67], wonach die besagten Kopplungen bei sehr tiefen Temperaturen vernachlässigbar sind.

symmetrische Tridiagonalmatrix hat analog zu Gl. (A3) (vgl. auch Ref. [60]) die Form

$$D_{l,l'}^j = \begin{cases} -f_{l-1}^j / \sqrt{M_l M_{l-1}} & \text{für } l' = l - 1, \\ (f_{l-1}^j + f_l^j) / \sqrt{M_l M_l} & \text{für } l' = l, \\ -f_l^j / \sqrt{M_l M_{l+1}} & \text{für } l' = l + 1, \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases} \quad (4.16)$$

Im Rahmen des NEGF-Formalismus kann aus dieser Matrix die Stromtransmission $\Xi^j(\omega)$ berechnet werden. Folgen wir den Schritten in Abs. 3.1 sowie in Anh. A.1 gilt für die Transmission akustischer Phononen

$$\Xi^j(\omega) = C^j \frac{\gamma_1^j(\omega) \gamma_2^j(\omega)}{|\det[M_N^j(\omega)]|^2} \quad \text{mit} \quad C^j = \prod_{l=1}^{N-1} \frac{(f_l^j)^2}{M_l M_{l+1}}. \quad (4.17)$$

Unter Verwendung des Landauer-Büttiker-Formalismus lässt sich nach (2.25) und aus (4.17) der Beitrag der akustischen Phononen zum gesamten Wärmetransport bestimmen. Wählt man ausschließlich Frequenzen

$$\omega < \omega_G := \min \left\{ v_{is}^j \frac{\pi}{L_i} \mid i = y, z; j = x, y, z; s = 1, 2 \right\}, \quad (4.18)$$

so existiert unterhalb dieser Grenzfrequenz ω_G keine Transversalmode mit einem Index $p, q \geq 1$ und damit keine angeregte optische Mode im gesamten System. Es wäre sonst für jedes s und jedes j

$$\begin{aligned} \omega(\vec{k}_{pq}^s) &= \sqrt{(v_{xs}^j k_{s,pq})^2 + \left(v_{ys}^j \frac{p\pi}{L_y}\right)^2 + \left(v_{zs}^j \frac{q\pi}{L_z}\right)^2} \\ &\geq \sqrt{\left(v_{ys}^j \frac{\pi}{L_y}\right)^2 + \left(v_{zs}^j \frac{\pi}{L_z}\right)^2} \\ &> \sqrt{\left(v_{is}^j \frac{\pi}{L_i}\right)^2}, \quad i = y \wedge i = z \\ &\geq \min \left\{ v_{is}^j \frac{\pi}{L_i} \mid i = y, z; j = x, y, z; s = 1, 2 \right\}, \end{aligned} \quad (4.19)$$

im Widerspruch zur Forderung (4.18). Für solche Frequenzen muss also $p, q = 0$ sein, wodurch der Wärmetransport allein durch den Beitrag der akustischen Phononen gege-

ben ist. Wie in Kap. 3 bzw. in Ref. [60] gezeigt, sind es gerade diese Moden, die bei tiefen Temperaturen zur QWL führen. Wir haben also, im Vergleich zum eindimensionalen, im dreidimensionalen Fall die zusätzliche Bedingung $\omega < \omega_G$ zu beachten.¹³ Dies ist dann gewährleistet, wenn das System eine kritische Temperatur T_K aufweist, unterhalb derer der Beitrag von Frequenzen $\omega \geq \omega_G$ zum Wärmestrom vernachlässigbar ist. Offensichtlich sind neben Systemen mit hohen Schallgeschwindigkeiten vor allem nanoskalige Systeme mit geringen L_y und L_z (vgl. Abb. 4.2) dafür prädestiniert. Berücksichtigen wir die Eigenschaften der Wellen (4.14), so zeigt die Bedingung $T < T_K$ gleichzeitig an, ab welcher Temperatur der Phononentransport in dreidimensionalen Systemen durch strikt eindimensionalen Transport dominiert wird.

Aus einer Betrachtung der Energiebeiträge¹⁴ der akustischen und optischen Phononen zum Wärmestrom lässt sich T_K abschätzen. Wie wir in Anh. A.7 zeigen, gilt für den relativen Strombeitrag der tiefsten, besetzbaren optischen Mode mit Grenzfrequenz ω_G , im Verhältnis zu einer der drei möglichen akustischen Moden j

$$\frac{J_o^{\rightarrow}}{J_a^{\rightarrow}} = \frac{\bar{\Xi}_o}{\bar{\Xi}_a^j} \kappa(x_G). \quad (4.20)$$

Neben der dimensionslosen Funktion $\kappa(x_G)$ mit $x_G = \hbar\omega_G/k_B T$, deren Verlauf Abb. 4.4 darstellt, hängt der relative Strombeitrag vom Verhältnis der effektiven Transmissionen $\bar{\Xi}_o$ und $\bar{\Xi}_a^j$ der optischen und akustischen Phononen ab. Für diese effektiven Transmissionen gilt:

$$\bar{\Xi}_o = \frac{\int_{\omega_G}^{\Omega_o} d\omega \Xi_o(\omega) (\hbar\omega/2\pi) N(\omega, T)}{\int_{\omega_G}^{\Omega_o} d\omega (\hbar\omega/2\pi) N(\omega, T)} \quad \text{und} \quad \bar{\Xi}_a^j = \frac{\int_0^{\Omega_j} d\omega \Xi_a^j(\omega) (\hbar\omega/2\pi) N(\omega, T)}{\int_0^{\Omega_j} d\omega (\hbar\omega/2\pi) N(\omega, T)}. \quad (4.21)$$

Sie stellen aus mathematischer Sicht den Mittelwert der Transmission $\Xi_o(\omega)$ bzw. $\Xi_a^j(\omega)$ bezüglich der Energieverteilung der Phononen $(\hbar\omega/2\pi)N(\omega, T)$ dar. Aus physikalischer Sicht sind die effektiven Transmissionen letztlich das Resultat eines Vergleiches des tatsächlichen mit dem maximal möglichen Phononenstrom ($\Xi(\omega) = 1$ auf dem erlaubten Intervall). Um zu entscheiden, ob der Beitrag der optischen Phononen nach (4.20) ver-

¹³Ein analoges Ergebnis gilt natürlich auch im zweidimensionalen Fall, bei dem jedoch nur eine Transversalmode zu berücksichtigen ist.

¹⁴Der Energiebeitrag ergibt sich aus den erlaubten und gleichzeitig besetzten Phononen mit der Energie $\hbar\omega$ und deren Beitrag zum Transport. Er ist also insbesondere von der Stromtransmission sowie der mittleren Besetzung nach der Bose-Einstein-Verteilung abhängig.

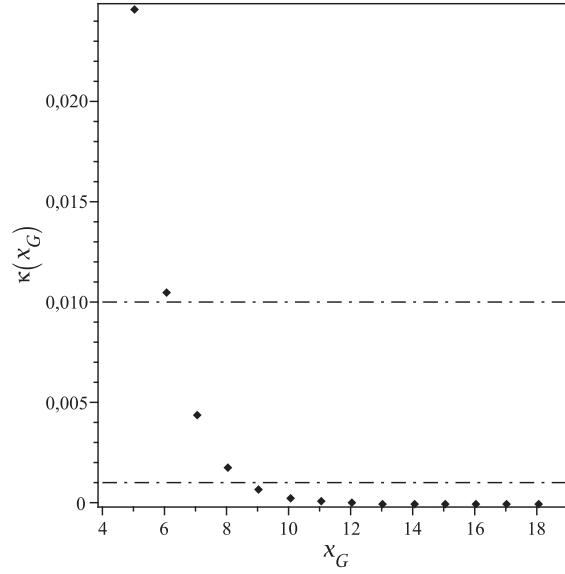


Abb. 4.4.: Werte der dimensionslosen Funktion $\kappa(x_G)$ für ganzzahlige $x_G = \hbar\omega_G/k_B T$. Zusätzlich sind als gestrichpunktete Linien die Niveaus 0,01 und 0,001 eingezeichnet, die für ungefähr $x_G = 6$ bzw. $x_G = 9$ erreicht werden.

nachlässigbar ist, sind drei Fälle zu erörtern. Ist die effektive Transmission der optischen Phononen größer als die der akustischen, so muss $\kappa(x_G) = \tilde{\kappa}(T)$ entsprechend klein werden. Dies ist nach Abb. 4.4 offensichtlich für große x_G und damit für sehr kleine T erreichbar. Ist jedoch die effektive Transmission der optischen Phononen kleiner als die der akustischen, so kann $\kappa(x_G) = \tilde{\kappa}(T)$ größer gewählt werden. Das wiederum ermöglicht höhere Temperaturen, bei denen der Beitrag der optischen Phononen dennoch gering ist. Im Spezialfall, dass $\bar{\Xi}_o$ und $\bar{\Xi}_a^j$ annähernd gleich sind,¹⁵ vereinfacht sich die Situation, so dass der Beitrag der optischen Phononen in einem bestimmten System nur von $x_G = \hbar\omega_G/k_B T$ und damit nur von der Temperatur abhängt. Die beiden letzteren Fälle, also $\bar{\Xi}_o \leq \bar{\Xi}_a^j$, sind im Regelfall bei tiefen Temperaturen sehr gut erfüllt. Der anschauliche Grund dafür ist die geringe Besetzung der kurzwelligen optischen Phononen, gepaart mit einer im Mittel stärkeren Streuung an Inhomogenitäten. Dadurch ist $J_o^{\rightarrow} < J_a^{\rightarrow}$. Die damit verbundene schlechtere Wärmeleitfähigkeit der optischen Phononen gegenüber den akustischen Phononen bei kleinen Temperaturen ist z. B. in den Abbn. 2a bis 2c aus Ref. [23] oder in den Abbn. 4a und 4e aus Ref. [67] zu sehen. Wir

¹⁵Dies ist z. B. der Fall in homogenen und translationsinvarianten Systemen. Um dies zu sehen, setzt man einfach unter Berücksichtigung der Integralgrenzen $\Xi_o(\omega) = 1$ und $\Xi_a^j(\omega) = 1$ in (4.21).

können somit den Strombeitrag der optischen Phononen durch $J_o^\rightarrow/J_a^\rightarrow = \kappa(x_G)$ nach oben abschätzen. Die kritische Temperatur ist dann mindestens

$$T_K = \frac{T_G}{6}, \quad (4.22)$$

wobei die Grenztemperatur $T_G = \hbar\omega_G/k_B$ direkt proportional zur Grenzfrequenz ω_G ist. Der Faktor $1/6$ ist dabei so bestimmt worden, dass der Energiebeitrag der optischen Phononen zum Transport lediglich ca. 1 % des Energiebeitrags der akustischen Phononen ausmacht (vgl. Abb. 4.4).

Aufgrund der Gültigkeit von (4.17) sind sämtliche Ergebnisse aus Kap. 3 nahezu unverändert auf den dreidimensionalen Fall übertragbar.¹⁶ Zusätzlich zur Bedingung T_K ist es also auch möglich, die mechanischen Bedingungen für das auftreten der QWL zu formulieren, die sich aus der Entwicklung der zugehörigen Transmissionsfunktion (4.17) um $\omega = 0$ ergeben. Analog zum Vorgehen in Anh. A.2 muss dann gelten:

$$\Xi_0^j = \frac{4\sqrt{y^j}}{[1 + \sqrt{y^j}]^2} = 1, \quad (4.23)$$

was genau für $y^j := M_{C2}f_{C2}^j/M_{C1}f_{C1}^j = 1 \Leftrightarrow M_{C1}f_{C1}^j = M_{C2}f_{C2}^j$ erfüllt ist. Der Index j zeigt dabei an, dass wir für jede der drei möglichen Polarisationen der akustischen Moden eine solche Bedingung auszuwerten haben. Die QWL, im Sinne von Gl. (3.25), finden wir also nur dann, wenn $y^j = 1$ für alle drei Moden j ist.¹⁷ Vom theoretischen Standpunkt aus sind also auch Systeme denkbar, in denen sogar die Kontakte unterschiedlich sein können. Lediglich das Produkt aus effektiver Masse und effektiver Kopplung für das jeweilige j muss gleich sein. Darüber hinaus ist dieses Ergebnis vollkommen unabhängig vom beliebig gearteten Streugebiet. Das bedeutet, dass die QWL für jedes System mit Streugebiet beobachtet werden kann, wenn wir ausreichend tiefe Temperaturen voraussetzen. Letztere Forderung ist wie folgt einzusehen: Die Gesamtwärmeleitfähigkeit ergibt sich nach Gl. (2.27) als Summe der Einzelbeiträge aller Moden. Für das Tieftemperaturverhalten der Wärmeleitfähigkeit sind also Beiträge der Form (3.24) zu summieren. Überführen wir diese dimensionslose Darstellung in ihre ursprüngliche Form, setzen also

¹⁶Insbesondere wenn wir die dortige Theorie für eine Kette formuliert hätten, deren Atome in allen drei Raumrichtungen schwingungsfähig sind.

¹⁷Der Index α' nimmt hierbei die Werte $j = 1, 2, 3$ an und zählt damit die drei möglichen Polarisationen der akustischen Moden ab.

$\beta := k_B T / \hbar \Omega$ und multiplizieren die Gleichung mit $\Lambda_\infty = k_B \Omega / 2\pi$, erhalten wir

$$\Lambda(T) = \sum_{j=1}^3 \Lambda_j(T) = \frac{\pi^2 k_B^2}{6\hbar} \Xi_0 T + \frac{\pi^3 k_B^4}{15\hbar^3} \Xi_2 T^3. \quad (4.24)$$

Hierbei sind dann aber

$$\Xi_0 = \sum_{j=1}^3 \Xi_0^j \quad \text{und} \quad \Xi_2 = \sum_{j=1}^3 \Xi_2^j, \quad (4.25)$$

wobei für eine vollständige QWL $\Xi_0 = \sum_{j=1}^3 \Xi_0^j = n_j$ zu fordern ist, wie durch Vergleich mit (3.25) ersichtlich wird. Entsprechend dem Vorgehen in Abs. 3.4.2 können wir mit Hilfe von (4.24) die Temperatur

$$T_\epsilon = \frac{\hbar}{\pi k_B} \sqrt{\epsilon \frac{5\Xi_0}{2|\Xi_2|}} \quad (4.26)$$

definieren. Sie gibt auch hier an, ab welcher Temperatur der Korrekturterm in (4.24) vernachlässigbar ist und somit die Quantisierung der Wärmeleitfähigkeit als dominanter Effekt in Erscheinung tritt. Damit (4.24) den tatsächlichen Verlauf der Wärmeleitfähigkeit bei tiefen Temperaturen richtig beschreibt, muss natürlich $T_\epsilon < T_K$ sein. Andernfalls wäre ihr Verlauf durch den Beitrag der optischen Phononen verändert und T_K als die relevante Temperatur für die Beobachtbarkeit der QWL zu verwenden. In der Darstellung der Wärmeleitfähigkeit $\Lambda(T)/T$ ergibt sich auch im dreidimensionalen Fall für Temperaturen $T < T_\epsilon$ ein Plateau, so dass wir auch hier für $T_\epsilon < T_K$ die Temperatur T_ϵ als die Plateauweite ansehen können. Der einzige Unterschied zwischen dem eindimensionalen und dem mehrdimensionalen Fall besteht also in der Verwendung der Größen (4.25), als Folge der Existenz mehrerer akustischer Moden sowie der zusätzlichen Bedingung $T < T_K$.

Fassen wir zusammen: In einem Kristall, der die in diesem Kapitel dargestellten strukturellen und geometrischen Anforderungen erfüllt, kann grundsätzlich die QWL auftreten, wenn $y^j = 1$ für alle j ist. Dieses Ergebnis ist unabhängig von der mechanischen Struktur des Streugebiets und unter Beachtung von $y^j = 1$ für alle j sogar für unterschiedliche Kontakte möglich. Die QWL kann also in komplett heterogenen Strukturen auftreten. Damit sie beobachtet werden kann, müssen die optischen Phononen für den Transportvorgang vernachlässigbar sein. Dies ist für Temperaturen $T < T_K$ der Fall, wobei T_K neben dem Systemparameter ω_G von den effektiven Transmissionen (4.21)

abhängt. Die Temperatur T_K ist also im Allgemeinen nicht unabhängig vom Streugebiet zu wählen. Generell sind auch die akustischen Phononen nicht unbeeinflusst vom Streugebiet, streuen aber für $T < T_\epsilon$ nur noch unwesentlich, so dass Terme höherer Ordnung in (4.24) vernachlässigbar sind. Dann zeigt die Wärmeleitfähigkeit in der Darstellung von $\Lambda(T)/T$ ein Plateau der Breite T_ϵ , welches der QWL entspricht. Diese Eigenschaft ist durch ihre Abhängigkeit von Ξ_2 ebenfalls vom Streugebiet beeinflusst.

Für eine weiterführende, völlig analoge Diskussion und Interpretation der hier nur kurz dargestellten Resultate verweisen wir auf den Abs. 3.4, insbesondere auf 3.4.2, und 3.5. Der unter anderem dort angestellte Vergleich unserer Ergebnisse mit der AMM-Theorie sowie die Analogie zur Optik sind auch hier möglich.

4.3. Interpretation und Vergleich der Ergebnisse mit dem Experiment

Um die Bedeutung der Größen und Bedingungen des vorangegangenen Abschnitts besser zu verstehen, wollen wir sie auf die experimentellen Daten aus [37] anwenden. In Abb. 3 aus Ref. [37] ist die experimentell bestimmte Wärmeleitfähigkeit $\Lambda(T)$ ¹⁸ dargestellt. In Abb. 4.5 haben wir, in Anlehnung daran, den Verlauf nachgebildet und zusätzlich die auftretenden Temperaturregime eingezeichnet. Die im Experiment benutzten Wellenleiter aus Siliziumnitrid haben an ihrer schmalsten Stelle eine Breite von ca. 200 nm.¹⁹ Schätzen wir in dieser Richtung die Schallgeschwindigkeit in Siliziumnitrid mit 6000 ms^{-1} [37, 68, 69], erhalten wir $T_K \approx 120 \text{ mK}$. Für Temperaturen $T < 120 \text{ mK}$ ist der Verlauf der Wärmeleitfähigkeit vergleichbar mit unserer Tieftemperaturentwicklung (4.24), wenngleich das Verhalten nicht durch Streuungen an einem Device und damit nicht direkt durch (4.24) beschrieben werden kann. Vielmehr ist, wie auch schon bei der Diskussion des eindimensionalen Falls, die Ursache hierfür in den Streuungen der Phononen durch andere Streumechanismen zu suchen. Hierzu zählen beispielsweise Streuungen durch die Oberflächenrauheit [40] oder an strukturellen Defekten [23]. Qualitativ ergibt sich aber ein ähnliches Bild: Die Wärmeleitfähigkeit ist in diesem Bereich ausschließlich durch die akustischen Phononen bestimmt und zeigt (quantisierte) Wärmeleiteigenschaften im

¹⁸Hier und auch wie zuvor in der üblichen Darstellung $\Lambda(T)/T$.

¹⁹Wegen der dort gewählten speziellen Form der Wellenleiter verhalten sich diese, zumindestens für kleine Frequenzen, wie ein homogenes und translationsinvariantes System mit einer durchgehenden Breite von 200 nm [30, 37]. Wir können daher (4.22) verwenden.

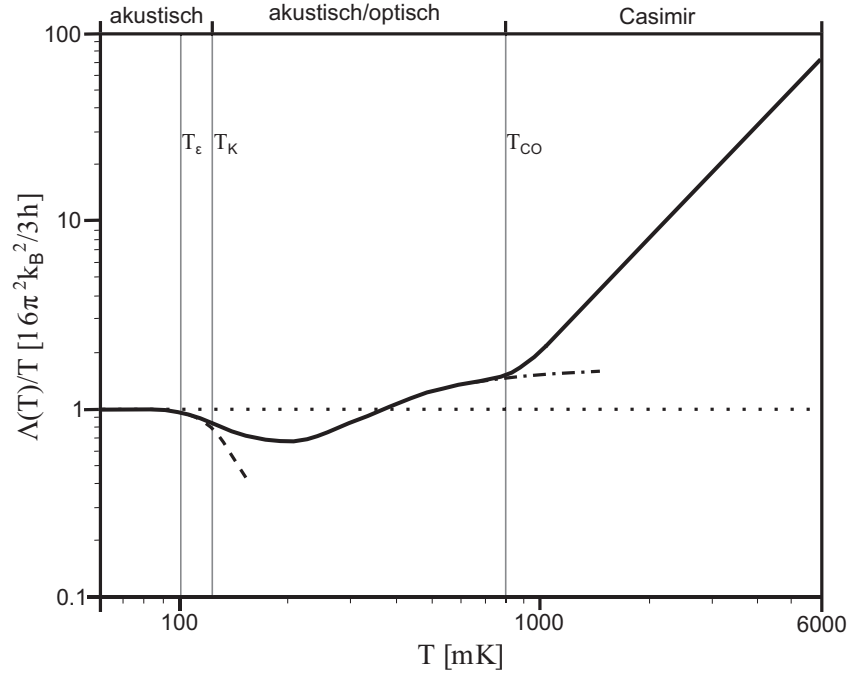


Abb. 4.5.: Schematische Darstellung der Wärmeleitfähigkeit $\Lambda(T)$, geteilt durch die Temperatur T in Einheiten von $16\pi^2 k_B^2/3h$ in Anlehnung an Ref. [37]. Gezeigt sind die verschiedenen Transportregime der Wärmeleitfähigkeit, deren theoretischer Verlauf innerhalb eines jeden Regimes durch die gepunktete, die gestrichelte und die gestrichpunktete Linie angedeutet ist. Detaillierte Erklärungen sind im Text zu finden.

Sinne der Gln. (3.24) und (3.25) für T geht gegen Null. Für $T < T_\epsilon$ ($T_\epsilon \approx 100$ mK) bildet sich ein Plateau bei dem $\Lambda(T)/T$ den sechzehnfachen Wert des Quants der QWL hat (gepunktete Linie). Der Grund für diesen speziellen Wert liegt im Aufbau des Experiments, in dem vier Wellenleiter mit je vier akustischen Schwingungsmoden (eine longitudinale, zwei transversale sowie eine Torsionsschwingung) verwendet wurden. Für Temperaturen $T_\epsilon < T < T_K$ gewinnt dann eine Korrektur, vergleichbar zum Term dritter Ordnung in unserer Tieftemperaturentwicklung (4.24), an Bedeutung. Diese Korrektur wird durch die oben beschriebenen Streuungen der immer stärker besetzten höherenergetischen Phononen bedingt. In der Folge verringert sich der Wert für $\Lambda(T)/T$ unter den Wert der QWL (gestrichelte Linie). Für Temperaturen $T > T_K = 120$ mK wird der Beitrag der optischen Phononen zum Wärmetransport messbar und überlagert den rein akustischen Transport. Das zuvor abfallende Verhalten der Wärmeleitfähigkeit wird in ein steigendes umgekehrt. Es bildet sich dadurch ein Minimum bei einer Temperatur von

ca. 200 mK aus. Dabei ist die Ausprägung des Minimums umso größer, je größer T_K im Verhältnis zu T_c ist. Dieser und der weitere Verlauf der Wärmeleitfähigkeit entlang der gestrichpunkteten Linie sind ein starkes Indiz dafür, dass die Wärme durch ein Mischregime aus akustischen und optischen Phononen transportiert wird (vgl. hierzu z. B. die numerischen Rechnungen basierend auf der Kontinuumsmechanik in den Refn. [23] und [67]). Bis zu einer Temperatur $T_{CO} = 800$ mK [37] handelt es sich dabei um ballistischen, quasi-eindimensionalen Transport. Dies wird verständlich, wenn man sich überlegt, dass die Wellenlänge der thermisch angeregten Phononen größer ist, als die laterale Ausdehnung der Probe [59, S. 256]. Schließlich folgt die Wärmeleitfähigkeit für $T > T_{CO}$ einem zu erwartenden T^3 -Gesetz²⁰, welches von der Probengeometrie sowie von der Oberflächenbeschaffenheit des Kristalls abhängt (vgl. [70] und [59, S. 251 ff.]). Ursächlich dafür sind die zunehmenden Reflexionen der Phononen an den Probenoberflächen. Das System verliert damit seinen quasi-eindimensionalen Charakter. Der Bereich in dem das T^3 -Gesetz Gültigkeit besitzt ist der sog. Casimir-Bereich, der beginnend bei ungefähr 1 K bis zu einer Temperatur von einigen K reicht. Für weiter steigende Temperaturen gewinnen Punktdefektstreuungen und Phononen-Phononen-Wechselwirkungen an Einfluss und beenden das T^3 -Verhalten durch eine wieder abnehmende Wärmeleitfähigkeit (vgl. z. B. [70, 71]). Das System geht dann in ein diffuses Transportregime über.

Um von dieser qualitativen Erklärung der Wärmeleitvorgänge bei tiefen Temperaturen zu einer quantitativen Beschreibung im Rahmen unseres Modells übergehen zu können, müssen wir die hier aufgeführten Größen und Bedingungen konkret festlegen. Dazu sind die von uns eingeführten effektiven Massen und Kopplungen von Nöten. Dieser Thematik wollen wir uns unter anderem in den nächsten Abschnitten widmen.

4.4. Effektive Kopplungen

Im Abs. 4.1 haben wir eine komplexe Kristallstruktur auf einen effektiven Kristall reduziert, indem wir die speziellen Eigenschaften langwelliger Phononen ausgenutzt haben. Im Zuge dessen benötigen wir entsprechende effektive Kopplungen, welche wir in diesem Abschnitt ableiten wollen.

Die Annahmen, die zum effektiven Kristall geführt haben, sind letztlich die selben,

²⁰Die Wärmeleitfähigkeit ist in diesem Bereich ($T_{CO} < T < \Theta/100$ mit der Debyetemperatur Θ von Siliziumnitrid in der Größenordnung 10^3 K) durch die spezifische Wärme $C_V \propto T^3$ der Debye-Theorie bestimmt.

welche für den mechanischen Kontinuumslikes der Elastizitätstheorie verwendet werden. Wie in [64, S. 134 ff.] gezeigt, sind dann die mikroskopischen Bewegungsgleichungen äquivalent zu den Bewegungsgleichungen eines elastischen Kontinuums. In der Folge können wir fordern, dass die Schallgeschwindigkeiten im diskreten Gitter sowie im Kontinuum identisch sind. Zum Beispiel gilt für die Zinkblendestruktur von Galliumarsenid (GaAs) mit kubischer, nicht primitiver EZ in der [100]-Richtung (vgl. z. B. [72]) und mit den Definitionen²¹ in Gl. (4.12)

$$v_{x,GaAs}^L = \sqrt{\frac{C_{11}^{GaAs}}{\rho_{GaAs}}} = \sqrt{\frac{f_{GaAs}^x d_{GaAs}^2}{M_{GaAs}}}, \quad (4.27)$$

$$v_{x,GaAs}^T = \sqrt{\frac{C_{44}^{GaAs}}{\rho_{GaAs}}} = \sqrt{\frac{f_{GaAs}^y d_{GaAs}^2}{M_{GaAs}}} = \sqrt{\frac{f_{GaAs}^z d_{GaAs}^2}{M_{GaAs}}}. \quad (4.28)$$

Dabei ist $v_{x,GaAs}^L := v_{x,GaAs}^x$ die Geschwindigkeit der longitudinalen Welle in x -Richtung und $v_{x,GaAs}^T := v_{x,GaAs}^y = v_{x,GaAs}^z$ die entsprechende, zweifach entartete Geschwindigkeit der transversalen Wellen. Weiterhin sind die C_{ii}^{GaAs} Komponenten des elastischen Tensors und $\rho_{GaAs} = M_{GaAs}/d_{GaAs}^3$ die Dichte im betreffenden kubischen Material. Aufgrund der gleichen Kristallstruktur sind diese Überlegungen ohne Weiteres auf Aluminiumarsenid (AlAs) übertragbar, insofern wir die dort geltenden Werte C_{ii}^{AlAs} und ρ_{AlAs} verwenden. Für die effektiven Kopplungen bekommen wir dann aus (4.27) und (4.28)

$$f_{GaAs}^x = d_{GaAs} C_{11}^{GaAs} \quad \text{und} \quad f_{GaAs}^y = f_{GaAs}^z = d_{GaAs} C_{44}^{GaAs}. \quad (4.29)$$

Werte für die C_{ii}^{GaAs} von GaAs, welche bei tiefen Temperaturen praktisch konstant sind, lassen sich z. B. in [73] finden. Mit dieser Methode können wir also die intra-materiellen Kopplungen bestimmen, d. h. für AlAs oder GaAs. Es kann aber auch vorkommen, dass wir für unsere Theorie inter-materielle Kopplungen, wie z. B. zwischen einem GaAs-Kontakt und einem AlAs-GaAs-Supergitter-Device, benötigen. Der Einfachheit halber wollen wir, wie auch schon zuvor in solchen Fällen, für diese Kopplungen annehmen, dass sie durch das arithmetische Mittel der Kopplungen der zwei beteiligten Materialien gegeben sind. Für AlAs-GaAs-Systeme sind die stofflichen Eigenschaften so ähnlich (vgl. Tab. 4.2), dass von dieser Näherung nur geringe Effekte auf den Phononentransport zu

²¹Wir verzichten hier auf die Indizes s und C_s , da sich dieser Zusammenhang nicht allein auf die Kontaktmaterialien beschränkt.

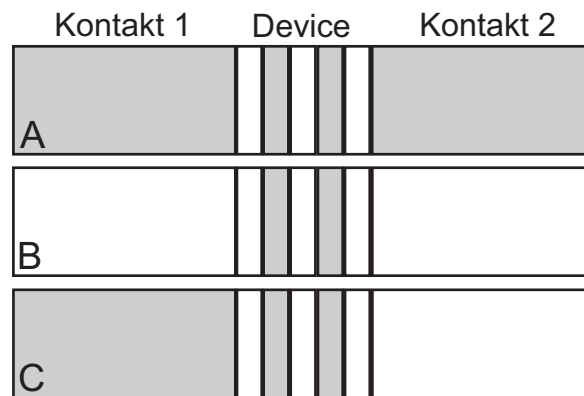


Abb. 4.6.: Schematische Darstellung verschiedener KDK-Systeme aus AlAs (grau) und GaAs (weiß) mit quadratischer Querschnittsfläche ($L_y = L_z$). Als Device fungiert jeweils eine Doppelbarriere aus epitaktisch gewachsenen Schichten der selben Materialien.

erwarten sind. Im Allgemeinen kann dies aber einen durchaus merklichen Einfluss haben, weshalb in solchen Fällen weitergehende Überlegungen anzustellen wären.

4.5. Anwendung auf ein Aluminiumarsenid-Galliumarsenid-System

Wir wollen nun unsere Erkenntnisse aus den voran gegangenen Abschnitten auf ein KDK-System mit einem abwechselnd, epitaktisch geschichteten Device aus AlAs und GaAs anwenden. Das Device ist dabei an homogene, nicht unbedingt gleichartige Kontakte aus AlAs oder GaAs gekoppelt (Abb. 4.6). Bei AlAs und GaAs handelt es sich im Vergleich zu Si-Ge-Systemen ebenfalls um technisch sehr interessante Materialien, welche jedoch aufgrund der sehr ähnlichen Gitterkonstante (vgl. Tab. 4.1) nahezu verspannungsfrei herzustellen sind. Wir können also in diesem Fall auf eine Diskussion von Phänomenen wie Gitterdeformationen und Fehlanpassungen verzichten.²²

In Abb. 4.7 ist die sog. Zinkblendestruktur dargestellt, in der sowohl AlAs als auch GaAs kristallisieren. Zu sehen ist die nicht primitive, kubische EZ in der die grauen Atome As-Atome und die weißen Atome, je nach Material, Al-Atome oder Ga-Atome

²²Dies ist ein exzellenter Ausgangspunkt für weitergehende Forschungen, die jedoch den Rahmen dieser Arbeit überschreiten.

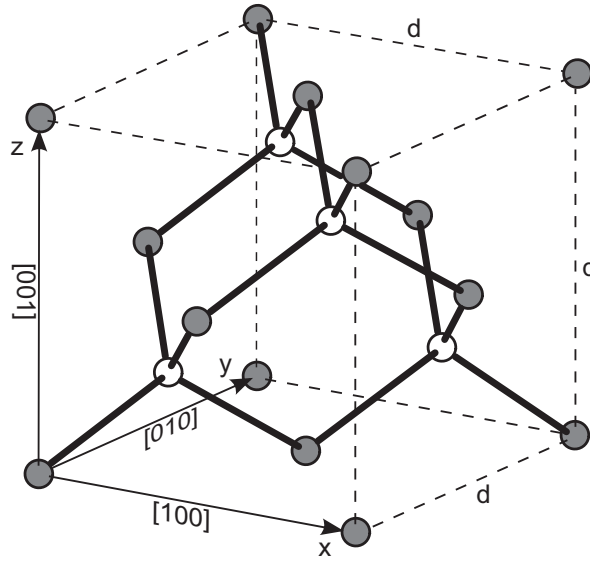


Abb. 4.7.: Schematische Darstellung der nicht primitiven, kubischen EZ der Zinkblendstruktur von AlAs und GaAs. Die grauen Kugeln symbolisieren hier die As-Atome und die weißen Kugeln stehen, je nach Material, für die Al-Atome (AlAs) bzw. Ga-Atome (GaAs). Ebenfalls gezeigt ist die Transportrichtung x , die mit der $[100]$ -Richtung zusammenfällt sowie die zwei lateralen Richtungen $y \leftrightarrow [010]$ und $z \leftrightarrow [001]$.

sind.²³ Nach den Überlegungen in Abs. 4.1 überführen wir nun jede EZ in das zugehörige Schwerpunktsystem, wobei der Schwerpunkt exakt im Zentrum der EZ zu finden ist (vgl. Abb. 4.7). Die effektive Masse²⁴ im Schwerpunkt für AlAs und GaAs finden wir in Tab. 4.2. Aus diesen Schritten resultiert ein effektiver Kristall mit kubischen Gitter. Die Gitterkonstante im effektiven Kristall ist identisch mit der Gitterkonstante d , der nicht primitiven kubischen EZ im ursprünglichen Kristall. Durch diese Transformationsschritte geht der komplexe Kristall also in den wesentlich einfacheren kubischen Kristall über, dessen Struktur wir schon in Abb. 4.2 schematisch dargestellt haben. Es bleiben jetzt noch die effektiven Kopplungen zu bestimmen, die wir nach Abs. 4.4 aus den elastischen

²³Die Zuordnung der Atome kann auch genau entgegengesetzt gewählt werden, wobei sich in diesem Fall ein äquivalenter Kristall in Zinkblendstruktur ergibt. Dies wird deutlich, wenn man sich den Kristallaufbau durch zwei kubisch-flächenzentrierte Gitter vorstellt, die gegeneinander um ein Viertel der Raumdiagonale der kubischen EZ gegen einander verschoben sind. Das eine Gitter trägt dabei As-Atome und das andere, materialabhängig, Al-Atome oder Ga-Atome.

²⁴Hierbei handelt es sich um die Summe der Massenanteile der Atome, die sich ganz oder nur teilweise in der EZ befinden. Es gilt $M_{A/G} = 8(1/8)M_{As} + 6(1/2)M_{As} + 4M_{Al/Ga}$ mit $M_{As} = 1,24 \cdot 10^{-25}$ kg, $M_{Al} = 4,48 \cdot 10^{-26}$ kg und $M_{Ga} = 1,16 \cdot 10^{-25}$ kg.

Tab. 4.1.: Elastische Konstanten C_{11} und C_{44} sowie die Gitterkonstanten d für AlAs und GaAs bei Raumtemperatur.

	C_{11} [GPa]	C_{44} [GPa]	d [pm]
AlAs	119,9	56,6	566,172
GaAs	119,0	59,5	565,359

Tab. 4.2.: Effektive Kopplungen f_L und f_T in longitudinaler sowie in der zweifach entarteten transversalen Richtung für das Bulk-Material (intra-materielle Kopplungen). An den Grenzflächen zwischen zwei Materialien verwenden wir die mit Index I gekennzeichneten Kopplungen (inter-materielle Kopplungen). In der letzten Spalte sind die effektiven Massen.

	f_L [N/m]	f_T [N/m]	f_L^I [N/m]	f_T^I [N/m]	M [kg]
AlAs	67,9	32,0	67,6	32,8	$6,75 \cdot 10^{-25}$
GaAs	67,3	33,6			$9,60 \cdot 10^{-25}$

Konstanten sowie den Gitterkonstanten der reinen Materialien berechnen können (vgl. Tab 4.1 nach [74]²⁵). Die Ergebnisse sind ebenfalls in Tab. 4.2 zusammengefasst.

Als konkrete Anwendungsfälle betrachten wir die Doppelbarrieren-Strukturen aus Abb. 4.6 mit überall gleicher quadratischer Querschnittsfläche ($A = L_y L_z = L^2$, $L = 10$ nm). Die Transportrichtung x wählen wir entlang der [100]-Richtung des Kristalls. Das Device sei aus alternierenden, gleich dicken Schichten, bestehend aus AlAs (grau) bzw. GaAs (weiß) aufgebaut. Jede Schicht bestehe dabei aus drei effektiven Atomen des jeweiligen Materials. Aufgrund der sehr ähnlichen Gitterkonstanten beider Materialien verlangen wir, dass sich im gesamten Device, über alle Schichten hinweg, eine mittlere Gitterkonstante $d := (d_{GaAs} + d_{AlAs})/2$ einstellt.²⁶

²⁵In Ermangelung eines vollständigen Parametersatzes für GaAs und insbesondere AlAs bei tiefen Temperaturen verwenden wir der Einfachheit halber die gut dokumentierten Werte bei Raumtemperatur. Da sich diese Werte nicht fundamental voneinander unterscheiden, erwarten wir, dass die so gefundenen Ergebnisse eine gute Näherung der tatsächlichen Gegebenheiten darstellen. Als Beispiel wollen wir hier C_{11}^{GaAs} betrachten. Nach [75] ist $C_{11}^{GaAs} = 12,17 \cdot 10^{11}$ dyn cm⁻² bei $T = 0$ K und $C_{11}^{GaAs} = 11,74 \cdot 10^{11}$ dyn cm⁻² bei $T = 300$ K. D.h. C_{11}^{GaAs} nimmt, im Übrigen linear, von $T = 0$ K auf $T = 300$ K um lediglich ca. 3,5 % ab.

²⁶Trotz der leicht differierenden Gitterkonstanten in den einzelnen Systemkomponenten (Device und

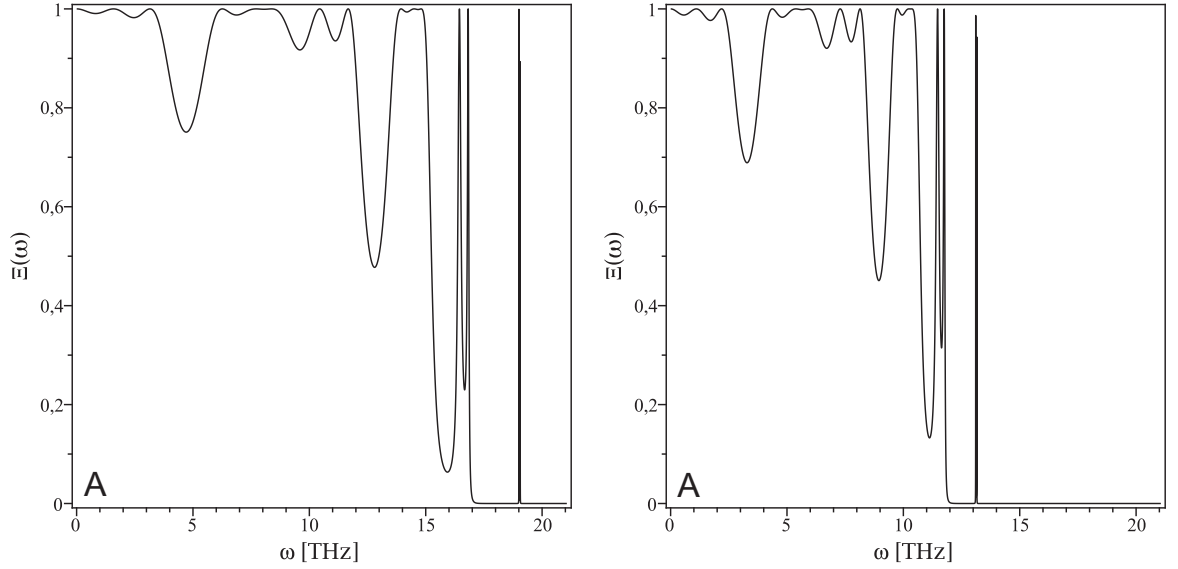


Abb. 4.8.: Verlauf der Stromtransmission $\Xi(\omega)$, als Funktion der Frequenz ω für das KDK-System A aus Abb. 4.6 mit zwei identischen AlAs-Kontakten. Im linken Teilbild ist die Transmission der longitudinalen Mode gezeigt, die gegenüber der Transmission der zweifach entarteten Transversalmoden (rechts) eine deutlich höhere “cut off”-Frequenz aufweist. Der Grund hierfür ist die stärkere Kopplung der Atome für die longitudinale Wellenausbreitung.

Wir setzen nun voraus, dass für die effektiven Transmissionen $\bar{\Xi}_o \leq \bar{\Xi}_a^j$ gilt, so dass wir die kritische Temperatur T_K näherungsweise nach Gl. (4.22) bestimmen können.²⁷ Sowohl in AlAs als auch in GaAs sind die Schallgeschwindigkeiten der longitudinalen und der zweifach entarteten transversalen Moden entlang der Hauptrichtungen $\langle 100 \rangle$ alle gleich groß [59, S. 170].²⁸ Dann können wir die Grenzfrequenz ω_G mit Hilfe der Gln. (4.27) und (4.28) sowie den Werten aus Tab. 4.1 bestimmen. Die kleinste Schallgeschwindigkeit entlang der $\langle 100 \rangle$ -Richtungen ergibt sich mit ca. 3340 m/s für die Transversalmode in GaAs. Daraus folgt nach (4.18) und (4.22) eine kritische Temperatur von mindestens $T_K = 1,3$ K. Für $T < T_K$ ist der phononische Wärmestrom und damit die Wärmeleitung allein auf den Beitrag der akustischen Moden zurück zu führen.

Kontakte) wollen wir die Struktur in Transportrichtung als geometrisch Invariant betrachten.

²⁷Zum Zwecke der Veranschaulichung des Wärmetransports bei tiefen Temperaturen soll uns diese grobe Bestimmung von T_K genügen. Für eine exaktere Bestimmung von T_K kommt man nicht um die explizite Berechnung der effektiven Transmissionen.

²⁸In diesen speziellen Richtungen sind AlAs und GaAs elastisch isotrop, im Allgemeinen jedoch anisotrop.

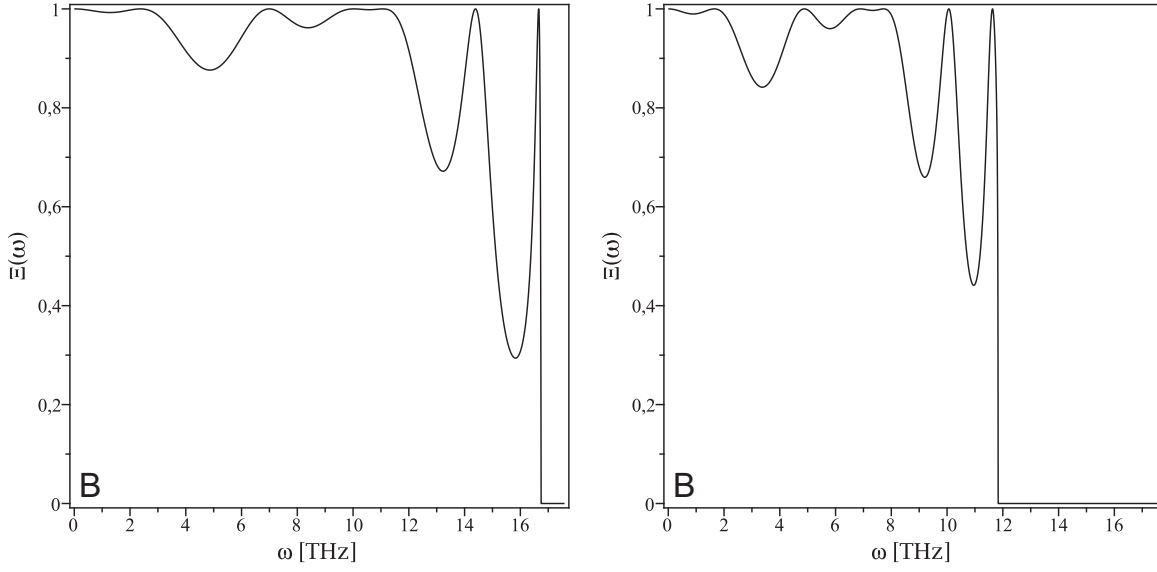


Abb. 4.9.: Verlauf der Stromtransmission $\Xi(\omega)$, als Funktion der Frequenz ω für das KDK-System B aus Abb. 4.6 mit zwei identischen GaAs-Kontakten. Im linken Teilbild ist die Transmission der longitudinalen Mode gezeigt, die gegenüber der Transmission der zweifach entarteten Transversalmoden (rechts) eine deutlich höhere “cut off”-Frequenz aufweist. Der Grund hierfür ist die stärkere Kopplung der Atome für die longitudinale Wellenausbreitung.

In diesem Fall ist die vorliegende effektive Kristallstruktur für die Beschreibung der Tieftemperatur-Transporteigenschaften, der in Abb. 4.6 zu findenden Doppelbarrieren-Systeme, entscheidend.

Ausgehend von Gl. (4.17) haben wir für die Systeme A, B und C die Transmission der drei akustischen Moden berechnet. In Abb. 4.8 sind die typischen, relativ komplizierten Peak-Strukturen der Transmission als Funktion der Frequenz für die longitudinale (links) und die zweifach entarteten transversalen Moden (rechts) aus System A dargestellt. Die Maximalfrequenzen der am Transport beteiligten Phononen sind durch die Kontakteigenschaften begrenzt. Wie im Eindimensionalen, sind die Maximalfrequenzen in der Form $\Omega_j = \min \left\{ 2\sqrt{f_{Cs}^j/M_{Cs}}, s = 1, 2 \right\}$ gegeben, wobei wir nun aber die verschiedenen Polarisierungen j zu berücksichtigen haben. Da die transversalen Kopplungen geringer ausfallen als die longitudinalen (vgl. Tab. 4.2), endet das Transmissionsspektrum der transversalen Moden deutlich eher. Wie nach Gl. (4.23) zu erwarten, hat die Transmission für alle drei Polarisierungen den Wert $\Xi(\omega \rightarrow 0) = \Xi_0 = 1$. Denn aufgrund der gleichartigen Kontakte sind die mechanischen Bedingungen $y^j = 1$ für alle j erfüllt.

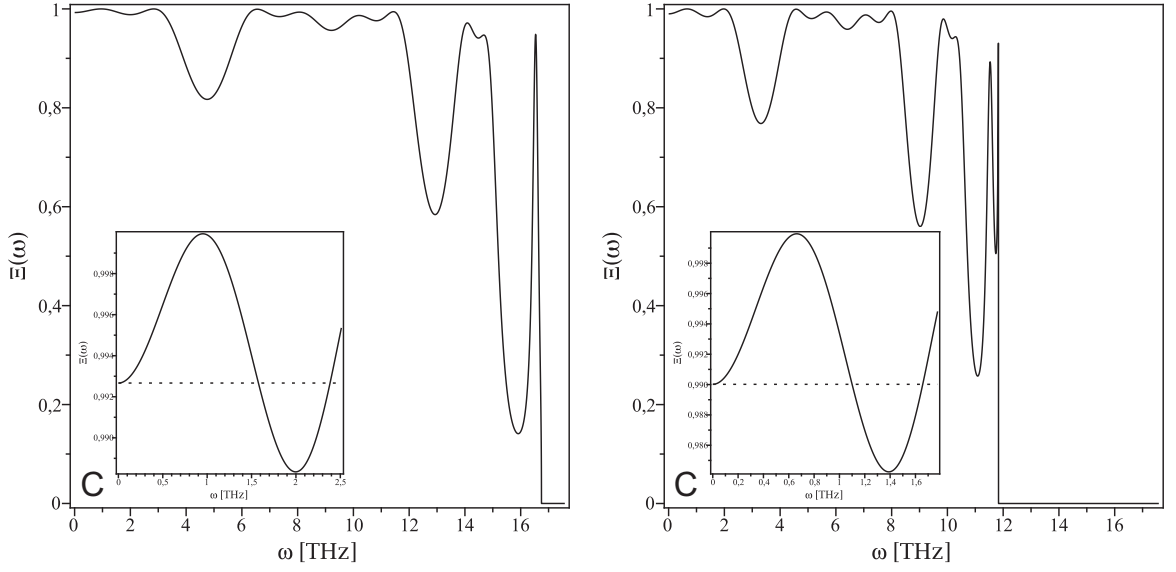


Abb. 4.10.: Verlauf der Stromtransmission $\Xi(\omega)$, als Funktion der Frequenz ω für das KDK-System C aus Abb. 4.6 mit einem Kontakt aus AlAs und einem aus GaAs. Im linken Teilbild ist die Transmission der longitudinalen Mode gezeigt, die gegenüber der Transmission der zweifach entarteten Transversalmoden (rechts) eine deutlich höhere “cut off”-Frequenz aufweist. Der Grund hierfür ist die stärkere Kopplung der Atome für die longitudinale Wellenausbreitung. Bestimmt wird hier die “cut off”-Frequenz durch die Eigenschaften von GaAs, da dieses Material die kleineren Maximalfrequenzen Ω_j aufweist. Zusätzlich ist in den kleineren Teilbildern jeweils die Transmission für kleine Frequenzen dargestellt. Erwartungsgemäß konvergieren sie nach (4.23) nicht gegen Eins für $\omega \rightarrow 0$.

Ein ähnliches Bild erhalten wir für das System B, dessen Transmissionen in Abb. 4.9 zu sehen sind. Die Peak-Struktur erscheint in diesem Fall als nicht ganz so kompliziert, was auf das weniger komplexe Device zurück zu führen ist. Aber auch hier gilt erwartungsgemäß $\Xi_0 = 1$ für alle akustischen Moden. Anders verhält es sich im System C, dessen Transmissionen in Abb. 4.10 gezeigt sind. Für die longitudinale Mode ist nach Gl. (4.23) und den Angaben in Tab. 4.2 $\Xi_0^L = 0,9927$. Dies bestätigt auch das numerisch berechnete “Inset” im linken Teilbild von Abb. 4.10. Analog bekommen wir für die transversalen Moden $\Xi_0^T = 0,990$. Die lediglich geringen Abweichungen vom Maximalwert $\Xi_0 = 1$ sind durch die sehr ähnlichen materiellen Eigenschaften von AlAs und GaAs zu begründen. Schließlich sind in Abb. 4.11 die Gesamttransmissionen der Systeme A, B und C als Summe der Einzeltransmissionen dargestellt. Auf deren Grundlage

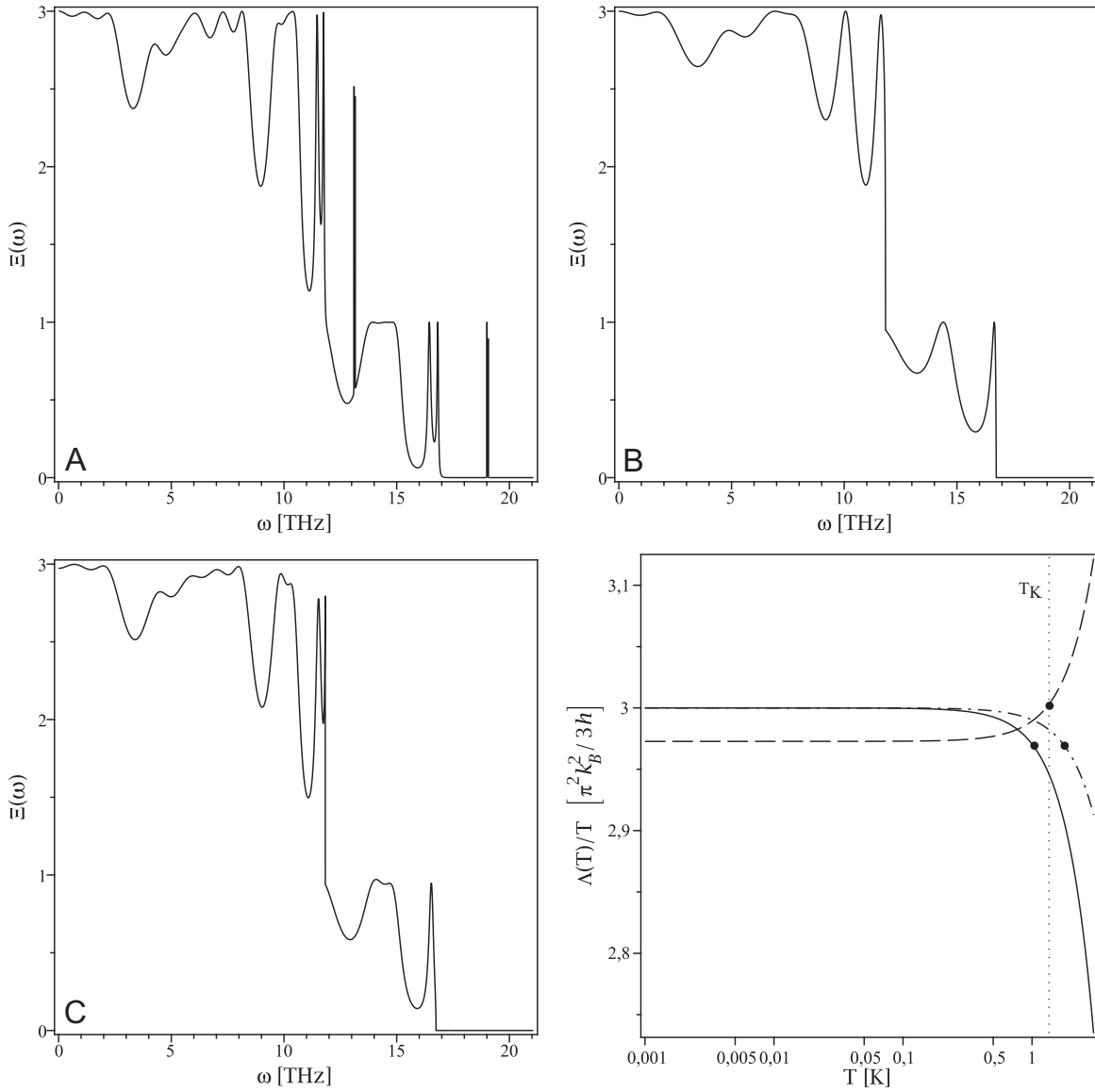


Abb. 4.11.: Verlauf der Gesamtstromtransmission $\Xi(\omega)$ der drei akustischen Moden, als Funktion der Frequenz ω für die KDK-Systeme A, B und C aus Abb. 4.6. Darüber hinaus ist im rechten, unteren Teilbild das Verhalten von $\Lambda(T)/T$ nach Gl. (4.24) für die drei Systeme A (durchgezogen), B (gestrichpunktet) und C (gestrichelt) dargestellt. Ebenfalls zu sehen sind die Temperaturen T_ϵ (schwarze Punkte) sowie die kritische Temperatur T_K (gepunktete Linie). Nähere Erläuterungen sind im Text zu finden.

haben wir die zugehörigen Wärmeleitfähigkeiten bei tiefen Temperaturen nach (4.24) bestimmt. In der Form $\Lambda(T)/T$ sind sie im vierten Teilbild von Abb. 4.11 zu sehen. Die

Wärmeleitfähigkeiten der Systeme A (durchgezogene Linie) und B (gestrichpunktete Linie) nehmen dabei exakt den dreifachen Quantenwert der QWL an, entsprechend der drei beteiligten akustischen Moden. Die Plateaubreite T_ϵ beträgt im Fall von System A ca. 1 K und für System B ca. 1,8 K, wobei $\epsilon = 0,01$ gewählt wurde. Dies ist gleichbedeutend mit einer Abweichung des Wertes für $\Lambda(T)/T$ um ca. 1 % vom Quantenwert der QWL. Im System C (gestrichelte Linie) erreicht das Plateau von $\Lambda(T)/T$ nur den Wert $\Xi_0 = \Xi_0^L + 2\Xi_0^T = 2,9727$ und damit nicht den vollen Wert der QWL. Die Plateaubreite ist hier ca. $T_\epsilon = 1,3$ K ($\epsilon = 0,01$) und damit ungefähr gleich zur kritischen Temperatur T_K . Eine weitere Besonderheit im System C ist die ansteigende Wärmeleitfähigkeit bei zunehmenden Temperaturen. In diesem Fall wird sich kein lokales Minimum bilden, wie wir es z. B. in Abb. 4.5 gesehen haben. In den anderen beiden Systemen hängt das Erscheinen des Minimums von dem Verhältnis der Temperaturen T_K und T_ϵ ab. Umso größer T_K gegenüber T_ϵ ist, umso stärker ausgeprägt ist das zu erwartende Minimum.

5. Zusammenfassung I

Nach einer kurzen Einführung in die grundlegenden Begriffe und Formalismen des phononischen Wärmetransports in nanoskaligen Heterostrukturen, haben wir uns speziell den Phänomenen bei tiefen und sehr tiefen Temperaturen zugewandt.

In einer induktiven Herangehensweise konnten wir eine Tieftemperaturentwicklung der ballistischen Wärmeleitfähigkeit für ein sehr allgemeines, eindimensionales KDK-System ableiten. Im Rahmen dieser Tieftemperaturentwicklung, welche wir nach der dritten Ordnung abgebrochen haben, fanden wir die QWL. Der Term führender Ordnung lieferte dabei die mechanische Bedingung für das Auftreten der Selbigen. Sie ist genau dann zu beobachten, wenn das Produkt aus der Kopplungskonstante und der Oszillatormasse in beiden Kontakten identisch ist. Dieses Ergebnis ist unabhängig vom Streugebiet (Device) und konnte unter Zuhilfenahme des AMM, dass für SJ-Systeme Gültigkeit besitzt, erklärt werden. Ausgehend von dieser und der weiteren Diskussion, erscheint das Konzept der QWL deutlich robuster als zuvor erwartet.

Im weiteren Verlauf der Wärmeleitfähigkeit, oberhalb einer bestimmten Temperatur T_ϵ , muss ein endlicher Korrekturterm berücksichtigt werden. Dieser führt zu einer Abnahme der Wärmeleitfähigkeit gegenüber ihrem idealen Wert und folgt einem T^3 -Verhalten. In unserem Fall ist die Abnahme durch die Streuung der Phononen am Device-Gebiet verursacht. Tiefergehende Untersuchungen an einem atomaren Leiter in der Form eines DJ-Systems illustrierten und bestätigten unsere allgemeinen Resultate. In diesem Zusammenhang fanden wir zwei Plateaus in der Darstellung $\Lambda(T)/T$. Das Erste entspricht der bei tiefen Temperaturen zu erwartenden QWL, während das Zweite bei etwas höheren Temperaturen auftritt und in einer engen Beziehung zu einem eher klassischen Transportbild steht. Zu verstehen ist diese Aussage durch den Ausdruck (3.44), welcher sich auch als die Transmission eines klassischen Teilchens auffassen lässt, in der wir sämtliche Phaseninformationen vernachlässigen (vgl. Ref. [20, S. 63]). Wir sehen für ausreichend hohe Temperaturen, dass wir nicht durch eine Messung der Wärmeleitfähigkeit zwischen Quantentransport und klassischem Transport unterscheiden können.

Hingegen ist für sehr tiefe Temperaturen ein signifikanter Unterschied festzustellen. Im Übergangsbereich zwischen den beiden Plateaus bekommen wir eine klare Abhängigkeit der Wärmeleitfähigkeit von der Länge des Devices - ein eher unerwartetes Ergebnis in einem ballistischen Transportregime.

Im daran anknüpfenden Kapitel gelang die Verallgemeinerung dieser Theorie für epitaktisch geschichtete, dreidimensionale KDK-Systeme. Die besondere Natur der langwelligen Phononen ermöglichte es komplexe Kristallstrukturen in einfachere, orthorhombische Kristalle zu transformieren. Die resultierenden Kristalle entsprachen dann dem Kontinuumslimit der Elastizitätstheorie, wodurch sich die mathematische Beschreibung fundamental vereinfachte. In der Folge stellte sich heraus, dass sich die zentralen Ergebnisse aus der eindimensionalen Betrachtung in analoger Weise auf den höherdimensionalen Fall übertragen ließen. Der wesentlichste Unterschied ergab sich in der Existenz von mehreren akustischen und optischen Moden, die nun am Transport beteiligt waren. Für das Auftreten der QWL in einem solchen System können nur die akustischen Phononen verantwortlich sein, wie wir schon anhand der eindimensionalen Systeme gelernt hatten. Der Beitrag der höherenergetischen optischen Phononen musste daher unter bestimmten Bedingungen vernachlässigbar sein. Tatsächlich konnten wir zeigen, dass es eine zusätzliche kritische Temperatur T_K gibt, unterhalb derer diese Forderung in den von uns betrachteten KDK-Systemen erfüllt ist. Die QWL selbst zeigt dann wieder ein Plateau der Breite T_ϵ und fällt daran anschließend wieder ab.

Oberhalb von T_K findet man ein Mischregime, in dem sowohl akustische als auch optische Phononen zu einem quasi-eindimensionalen Transport beitragen. Durch die zunehmende Zahl an besetzten optischen Phononen für weiter steigende Temperaturen geht $\Lambda(T)/T$ in einen steigenden Verlauf über, wodurch sich ein Minimum ausbilden kann. Dieses Transportregime wird schließlich ab einer Temperatur T_{CO} durch den zunehmenden Einfluss der Probenoberflächen und deren Beschaffenheit auf die Phononen aufgelöst. Im sich anschließenden Casimirbereich, gültig bis zu einigen Kelvin, zeigt die Wärmeleitfähigkeit ein steigendes T^3 -Verhalten. Für weiter zunehmende Temperaturen fällt die Wärmeleitfähigkeit dann schließlich wieder ab und wird durch diffusive Phänomene dominiert. Die Interpretation der Ergebnisse und deren Diskussion sind dabei konsistent mit der Literatur sowie den wenigen experimentellen Daten.

Teil II.

Thermische Eigenschaften integrierter Quantenbauelemente eingebettet in ihre Chipumgebung

6. Einleitung II

Eine erste Untersuchung einiger grundlegender thermischer Eigenschaften integrierter Bauelemente war Gegenstand des Artikels [76]. Dieser ist im breiten Umfang die Grundlage der nachstehenden Kapitel, die sich mit dem Problem der Wärmeerzeugung in integrierten Schaltkreisen und deren Transport durch den Chip beschäftigen. Solche Prozesse stellen immer einen ungewollten “Verlust” an Energie dar, die unter Umständen aufwendige Kühlmaßnahmen erfordern. Darüber hinaus führt die Überhitzung elektronischer Komponenten zu Leistungseinbußen und vermindert gleichzeitig die langfristige Zuverlässigkeit.

Wir wollen das Aufheizen von QB studieren und betrachten dazu die folgende vereinfachte Chipgeometrie (vgl. Abb. 6.1): Im Zentrum des Chips haben wir in Rot eine aktive Schicht, das “Front End Of Line” (FEOL), bestehend aus Milliarden von Transistoren. Mit Blick auf die aktuellen Entwicklungen in der MOSFET-Technologie (Metal-Oxide-Semiconductor Field-Effect Transistor) können wir innerhalb der nächsten Dekade Transistoren mit Kanallängen von ungefähr 10 nm erwarten, was zu einer weiteren Zunahme der Transistorendichte im FEOL führt. Daraus resultiert eine hohe und weiter steigende Energiedichte im FEOL, die sich aus der orts- und zeitabhängigen Verteilung an produzierter Joulescher Wärme ergibt. Diese wiederum wird durch Milliarden von Rechenoperationen, an denen die QB beteiligt sind, verursacht. Oberhalb des FEOL, ebenfalls in Rot dargestellt, befindet sich eine Schicht, die eine große Zahl an elektrischen Leitungen enthält. Es handelt sich um das sog. “Back End Of Line” (BEOL), in welchem ebenfalls Wärme produziert wird. Schließlich haben wir in Blau eine Kühlungsschicht, über welche die erzeugte Wärme abgeführt werden kann. Von dieser Geometrie ausgehend formulieren wir ein thermoelektrisches Modell, in dem der Ladungstransport im FEOL in quasi-eindimensionalen Transistoren stattfindet und durch die quantenmechanische Tsu-Esaki-Formel beschrieben werden kann. Dieser Ladungstransport ist dann an die Wärmeleitgleichung gekoppelt, die den Wärmeaustausch zwischen FEOL und dem als externes Wärmereservoir angenommenen BEOL sowie dem

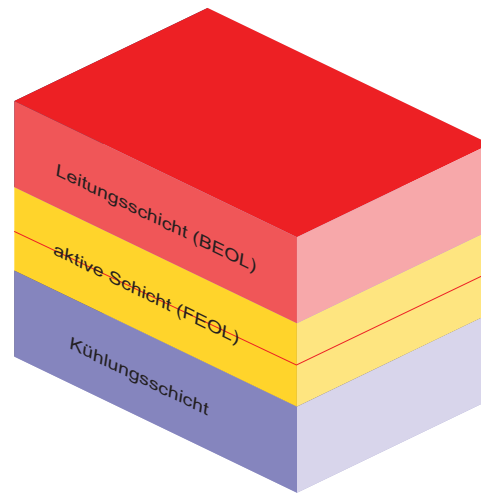


Abb. 6.1.: Stark vereinfachte Darstellung einer Chipgeometrie, die sich in drei wesentliche Bereiche einteilen lässt. Rot: Die Leitungsschicht, bestehend aus einer Vielzahl an elektrischen Leitungen. Gelb: Die innere Chipstruktur, welche eine aktive Zone beinhaltet, die durch Milliarden von Transistoren gebildet wird. Blau: Die Kühlungsschicht, die üblicherweise an ein Kühlsystem gekoppelt ist und als Wärmesenke fungiert.

Kühlungsschichtreservoir beschreibt. Wir vernachlässigen dabei komplett die mikroskopische Struktur dieses Kopplungsprozesses, indem wir voraussetzen, dass die zeitlich gemittelte dissipierte Joulesche Energie UI gleichmäßig über einem QB freigesetzt wird. Dadurch können wir weiter annehmen, dass das QB unter einer einheitlichen Temperatur arbeitet. Schließlich ist es unter den obigen Voraussetzungen möglich ein ebenfalls quasi-eindimensionales Modell des Wärmeleitproblems zu konstruieren. Dazu betrachten wir als erstes die aktive Schicht, als ein sich periodisch wiederholendes Feld von Kopien desselben QB, welche alle unter der Temperatur T arbeiten. Als zweites erfolgt die Wärmeleitung durch ein homogenes, die aktive Schicht umgebendes Medium, wobei die thermische Umgebung durch die zwei parallel dazu angeordneten Wärmesenken und/oder -quellen (Kühlungsschicht/BEOL) repräsentiert wird.

Unter diesen starken Näherungen kann unser thermoelektrisches Modell auf ein Standard-Fixpunktproblem reduziert werden, welches für nicht-quantenmechanischen Transport in Bipolartransistoren [77–79] und in Feldeffekttransistoren (FET) [80] analysiert wurde. Wir lösen die Fixpunktgleichung für die Drain-Charakteristik eines Quanten-FET, wobei sich die resultierenden Fixpunkttemperaturen als stabil erweisen.

7. Das grundlegende thermische Modell

In diesem Kapitel behandeln wir das makroskopische Wärmeleitproblem, welches sich in einer stark idealisierten Chipstruktur ergibt. Dafür entwickeln wir unter Berücksichtigung der wichtigsten Komponenten ein möglichst einfaches eindimensionales Modell der thermodynamischen Umgebung, dass sich mit Hilfe der inhomogenen Wärmeleitungsgleichung beschreiben lässt. Die Inhomogenität repräsentiert dabei einen Quellterm der die Wärmeentwicklung der aktiven elektronischen Bauelemente im Chip darstellt. Im weiteren Verlauf dieses Teils der Arbeit ersetzen wir die hier noch undifferenzierten elektronischen Bauelemente durch Nanotransistoren. Auf Basis der sich ergebenden Zusammenhänge können wir die thermischen Eigenschaften des Chips in Abhängigkeit der RB sowie der geometrischen Verhältnisse analysieren.

7.1. Modellierung der thermischen Umgebung

Wir betrachten das in Abb. 7.1 dargestellte eindimensionale, inhomogene Wärmeleitproblem. Es ergibt sich durch den typischen Aufbau eines Chips, bestehend aus der oberen Verdrahtungsschicht für $x \geq H$, der unteren Kühlungsschicht für $x \leq 0$ sowie einer sich dazwischen befindlichen aktiven Schicht um $x = d$. Die obere und die untere Schicht werden hierbei als thermische Reservoirs angesehen, welche sich auf den gegebenen Temperaturen θ_1 und $\theta_2(t)$ befinden und die Ränder unseres Systems darstellen. Die Zeitabhängigkeit der Temperatur $\theta_2(t)$ in der oberen Verdrahtungsschicht wird durch die dort fließenden Schaltungsströme verursacht. Die Temperatur dieser Schicht wird durch die in ihr dissipierte Joulesche Wärme bestimmt. Die aktive Schicht besteht aus einer Vielzahl identischer elektronischer QB, wobei wir jedem das kleine Volumen ΔV zuordnen. Des Weiteren seien die QB homogen in der Schicht verteilt und unterliegen

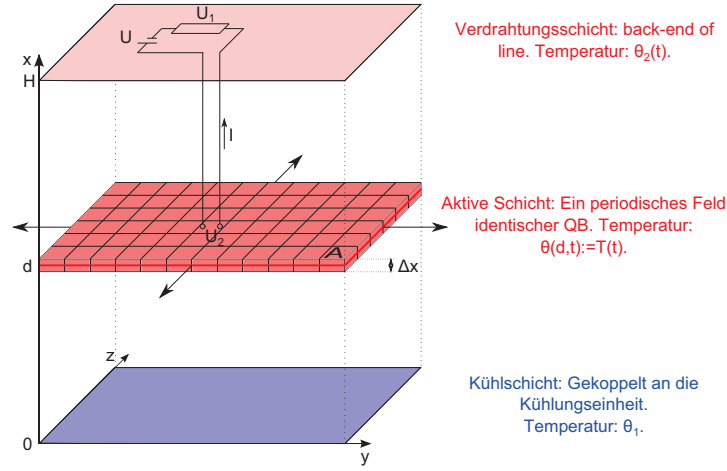


Abb. 7.1.: Stark idealisierte Darstellung der Chipstruktur, die an eine Kühleinschicht (Wärmereservoir) gekoppelt ist. Im Zentrum sehen wir ein Feld identischer und homogen verteilter QB sowie die darüber liegende Verdrahtungsschicht, die ein zweites Wärmereservoir darstellt. Nähere Erläuterungen sind im Text zu finden.

alle der gleichen Kontrollspannung $U_2(t)$. In dieser Schicht wird ebenfalls elektrische Leistung $U_2(t)I(T(t), t)$ dissipiert, was sie zu einer Wärmequelle $K(x, t)$ macht. Durch die sehr hohen Schaltungsfluktuationen und die von uns als gut vorausgesetzten Wärmeleiteigenschaften des umgebenden Materials (kleine Wärmediffusionszeit t_0 , vgl. auch Abs. 7.3) befindet sich die aktive Schicht auf einer mittleren Temperatur $\theta(d, t) := T(t)$. Hier ist $\theta(x, t)$ die raum- und zeitabhängige Temperatur im Medium für $t \geq 0$ und $0 \leq x \leq H$. Das sich zwischen den Schichten befindliche Material ist in einer ersten Näherung homogen und besitzt die Wärmeleitfähigkeit¹ λ , die Massendichte ρ sowie die Wärmekapazität c_V . Eine adäquate Darstellung des inhomogenen Wärmeleitproblems mit Quelle $K(x, t)$ lässt sich aus der in Abb. 7.1 dargestellten Geometrie und der Kontinuitätsgleichung ableiten. Wir betrachten dazu das kleine Volumen $\Delta V = A\Delta x$ mit $\Delta x = (d + \Delta x/2) - (d - \Delta x/2)$ um die aktive Schicht herum. Wir formulieren die allgemeine eindimensionale Kontinuitätsgleichung der Thermodynamik:

$$\frac{\partial \rho_W(x, t)}{\partial t} + \frac{\partial j(x, t)}{\partial x} = \tilde{K}(x, t), \quad (7.1)$$

¹Die hier verwendete **spezifische** Wärmeleitfähigkeit λ hat die Einheit [W/mK] und ist damit von der Wärmeleitfähigkeit [W/K], welche wir im ersten Teil dieser Arbeit eingeführt haben, zu unterscheiden.

wobei $\rho_W(x, t)$ die Wärmedichte im Volumen ΔV und $j(x, t)$ die Wärmestromdichte durch die Stirnflächen A des Volumen ΔV ist. Des Weiteren ist $\tilde{K}(x, t)$ im Allgemeinen eine Quell- oder Senkendichte im Volumen ΔV , welche diesem eine bestimmte Wärmeleistung zuführt bzw. entzieht. Ziel ist es nun (7.1) in die eindimensionale Wärmeleitungsgleichung zu überführen. Wir schreiben hierzu die zeitliche Änderung der Wärmedichte, mit Hilfe der infinitesimalen kalorischen Grundgleichung $dQ = dm c_V d\theta$, als

$$\frac{\partial \rho_W(x, t)}{\partial t} = \frac{dQ}{dV dt} = \frac{dm c_V d\theta}{dV dt} = \rho c_V \frac{\partial \theta(x, t)}{\partial t}. \quad (7.2)$$

Hier ist $\rho = dm/dV$ die überall im System konstante Massendichte und $c_V(T) = c_V$ die für hohe Temperaturen ebenfalls nahezu konstante spezifische Wärmekapazität². Für die Wärmestromdichte in x -Richtung durch die Flächen A können wir das Fouriersche Gesetz verwenden. Es folgt

$$\frac{\partial j(x, t)}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left[-\lambda \frac{\partial \theta(x, t)}{\partial x} \right] = -\lambda \frac{\partial^2 \theta(x, t)}{\partial x^2}, \quad (7.3)$$

worin wir die spezifische Wärmeleitfähigkeit λ ebenfalls als materialspezifische Konstante ansehen. Da die elektronischen Bauelemente in der aktiven Schicht am Ort d elektrische Leistung $dQ_{el}/dt = U_2 I[T(t)]$ in Wärme dissipieren, handelt es sich bei $\tilde{K}(x, t)$ um eine Quelldichte für die wir schreiben können

$$\tilde{K}(x, t) = \frac{dQ_{el}}{dV dt} = \frac{U_2 I[T(t)]}{A dx} = \frac{U_2 I[T(t)]}{A} \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta x} = \frac{U_2 I[T(t)]}{A} \delta(x - d). \quad (7.4)$$

Wie oben erläutert, betrachten wir hier die sehr schnell fluktuierenden Größen $U_2(t)$ und $I[T(t), t]$ bzgl. des Schaltverhaltens als zeitlich gemittelt. Der elektrische Strom $I[T(t)]$ bleibt dabei durch seine Temperaturabhängigkeit implizit eine Funktion der Zeit. Den Grenzübergang $\Delta x \rightarrow 0$ können wir einführen, da wir davon ausgehen, dass die Dicke Δx der aktiven Schicht vernachlässigbar gegenüber der Ausdehnung des Chips in x -Richtung ist. Die "Funktion" $\delta(x - d) = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} 1/\Delta x$ für $x \in (d - \Delta x/2, d + \Delta x/2)$ und $\delta(x - d) = 0$ sonst, ist dann eine der möglichen Darstellungen der Delta-Distribution³, denn sie erfüllt die folgenden zwei Eigenschaften:

²Für hohe Temperaturen T folgt $c_V(T)$ in guter Näherung dem Dulong-Petit-Gesetz.

³In der Literatur findet man an Stelle von Δx üblicherweise ϵ mit der Eigenschaft, dass wir ϵ beliebig klein wählen können.

Für $x \in (d - \Delta x/2, d + \Delta x/2)$ ist

$$\lim_{\Delta x \rightarrow 0} \int_{d-\Delta x/2}^{d+\Delta x/2} dx \frac{1}{\Delta x} = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta x} [d + \Delta x/2 - d + \Delta x/2] = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} 1 = 1. \quad (7.5)$$

Stammt x hingegen nicht aus obigen Intervall ist das Integral entsprechend unserer Definition der Delta-Distribution Null. Setzen wir nun die Terme (7.2), (7.3) und (7.4) in die Kontinuitätsgleichung (7.1) ein und teilen durch ρc_V , erhalten wir die Wärmeleitungsgleichung

$$\frac{\partial \theta(x, t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 \theta(x, t)}{\partial x^2} + \frac{U_2 I[T(t)]}{\rho A c_V} \delta(x - d). \quad (7.6)$$

Die Inhomogenität, welche als Quellterm $K(x, t)$ fungiert, ist somit folgendermaßen zu definieren:

$$K(x, t) := \frac{U_2 I[T(t)]}{\rho A c_V} \delta(x - d) = Q[T(t)] \delta(x - d). \quad (7.7)$$

Der Term $Q[T(t)]$ erzeugt dabei die Kopplung zwischen thermischen und elektrischen Transport. Aus Gl. (7.6) leitet sich dann das zu lösende Wärmeleitproblem im gesamten System ab. Die Formulierung und Lösung ist Gegenstand des anschließenden Abschnitts.

7.2. Wärmeleitproblem

Aus den vorangegangenen Überlegungen erhalten wir mit Hilfe der Wärmeleitungsgleichung (7.6) das nachstehende inhomogene Anfangs- und Randwertproblem:

$$\begin{aligned} \theta_t(x, t) &= D \theta_{xx}(x, t) + K(x, t) \quad \text{für } 0 < x < H \quad \text{und } t \geq 0, \\ \theta(0, t) &= \theta_1 \quad \text{für } t \geq 0, \\ \theta(H, t) &= \theta_2(t) \quad \text{für } t \geq 0, \\ \theta(x, 0) &= \Phi(x) \quad \text{für } 0 < x < H. \end{aligned} \quad (7.8)$$

Hierbei sind $\theta_t(x, t) = \partial \theta(x, t) / \partial t$, $\theta_{xx}(x, t) = \partial^2 \theta(x, t) / \partial x^2$ und $\Phi(x)$ die Anfangstemperaturverteilung zum Zeitpunkt $t = 0$ sowie $D = \lambda / \rho c_V$. Um dieses Problem zu lösen, transformieren wir es mit Hilfe von $\theta(x, t) = v(x, t) + w(x, t)$ auf ein Wärmeleitproblem für $v(x, t)$ mit festen RB. Einsetzen des Transformationsansatzes in (7.8) ergibt für die

Wärmeleitgleichung:

$$v_t(x, t) - Dv_{xx}(x, t) = K(x, t) - w_t(x, t) + Dw_{xx}(x, t) := \bar{K}(x, t). \quad (7.9)$$

Für die Anfangs- und Randwerte gilt weiter

$$v(0, t) = \theta_1 - w(0, t), \quad v(H, t) = \theta_2(t) - w(H, t) \quad \text{und} \quad v(x, 0) = \Phi(x) - w(x, 0). \quad (7.10)$$

Wählen wir nun die Funktion $w(x, t)$ so, dass sie die gleichen RB wie $\theta(x, t)$ erfüllt, also $w(0, t) = \theta_1$ und $w(H, t) = \theta_2(t)$, reduziert sich unser Wärmeleitproblem auf

$$\begin{aligned} v_t(x, t) &= Dv_{xx}(x, t) + \bar{K}(x, t) \quad \text{für } 0 < x < H \quad \text{und } t \geq 0, \\ v(0, t) &= 0 \quad \text{für } t \geq 0, \\ v(H, t) &= 0 \quad \text{für } t \geq 0, \\ v(x, 0) &= \Phi(x) - w(x, 0) \quad \text{für } 0 < x < H. \end{aligned} \quad (7.11)$$

7.3. Lösung des Wärmeleitproblems

Wir behandeln dieses Problem jetzt, indem wir die gesuchte Lösung $v(x, t)$ in eine Fourier Reihe entwickeln, welche die gegebenen RB erfüllt. Wir machen also einen Ansatz der Form

$$v(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} v_n(t) \sin\left(\frac{n\pi}{H}x\right). \quad (7.12)$$

Die zeitabhängigen Fourierkoeffizienten $v_n(t)$ sind dabei in der üblichen Weise gegeben durch

$$v_n(t) = \frac{2}{H} \int_0^H v(x, t) \sin\left(\frac{n\pi}{H}x\right) dx. \quad (7.13)$$

Wir haben hierbei ausgenutzt, dass es sich bei (7.12) um die Entwicklung einer ungeraden, $2H$ -periodischen Funktion auf $[-H, H]$ handelt. Aufgrund der Achsensymmetrie von $v(x, t) \sin(n\pi x/H)$ betrachten wir das im Entwicklungskoeffizienten auftretende Integral nur auf dem Intervall $[0, H]$ und verdoppeln zum Ausgleich den Integralwert. In analoger Weise entwickeln wir auch die Inhomogenität $\bar{K}(x, t)$:

$$\bar{K}(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} \bar{K}_n(t) \sin\left(\frac{n\pi}{H}x\right) \quad \text{mit} \quad \bar{K}_n(t) = \frac{2}{H} \int_0^H \bar{K}(x, t) \sin\left(\frac{n\pi}{H}x\right) dx. \quad (7.14)$$

Wir wollen nun $\bar{K}(x, t) = K(x, t) - w_t(x, t) + Dw_{xx}(x, t)$ näher bestimmen. Wir haben von der Funktion $w(x, t)$ verlangt, dass sie die gegebenen RB erfüllt. Eine möglichst einfache Funktion die dies leistet, ist die stationäre Lösung eines homogenen Wärmeleitproblems mit dem gleichen Rand. Es gilt offensichtlich

$$w(x, t) = \theta_1 + \frac{x}{H} (\theta_2(t) - \theta_1) \quad \text{mit} \quad w_t(x, t) = \frac{x}{H} \dot{\theta}_2(t) \quad \text{und} \quad w_{xx}(x, t) = 0, \quad (7.15)$$

wobei $\dot{\theta}_2(t) = d\theta_2(t)/dt$ ist. Verwenden wir nun die von uns in (7.7) gefundene deltaförmige Quelle $K(x, t) = Q[T(t)]\delta(x - d) := q(t)\delta(x - d)$, dann können wir schreiben:

$$\bar{K}(x, t) = q(t)\delta(x - d) - \frac{x}{H} \dot{\theta}_2(t). \quad (7.16)$$

Setzen wir dieses Ergebnis in den Entwicklungskoeffizienten (7.14) ein, erhalten wir

$$\bar{K}_n(t) = \frac{2}{H} q(t) \sin\left(\frac{n\pi}{H} d\right) - \frac{2}{H^2} \dot{\theta}_2(t) \int_0^H x \sin\left(\frac{n\pi}{H} x\right) dx. \quad (7.17)$$

Das auf der rechten Seite auftretende Integral können wir mit den Setzungen $\chi := x/H$ und $\phi := n\pi$ wie folgt auswerten:

$$\begin{aligned} \frac{2}{H} \int_0^H \frac{x}{H} \sin\left(\frac{n\pi}{H} x\right) dx &= 2 \int_0^1 \chi \sin(\phi\chi) d\chi = -2 \frac{\partial}{\partial \phi} \int_0^1 \cos(\phi\chi) d\chi \\ &= -\frac{2}{n\pi} \cos(n\pi) = -\frac{2(-1)^n}{n\pi}. \end{aligned} \quad (7.18)$$

Insgesamt bekommen wir dann für unsere Quelltermentwicklung mit Hilfe von (7.14)

$$\bar{K}_n(t) = \frac{2}{H} q(t) \sin\left(\frac{n\pi}{H} d\right) + \frac{2(-1)^n}{n\pi} \dot{\theta}_2(t) \quad (7.19)$$

$$\Rightarrow \bar{K}(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} \left[\frac{2}{H} q(t) \sin\left(\frac{n\pi}{H} d\right) + \frac{2(-1)^n}{n\pi} \dot{\theta}_2(t) \right] \sin\left(\frac{n\pi}{H} x\right). \quad (7.20)$$

Durch den Vergleich des ersten Summanden auf der rechten Seite mit (7.16) finden wir eine Darstellung der Deltafunktion auf dem Intervall $[0, H]$ mit

$$\delta(x - d) = \frac{2}{H} \sum_{n=1}^{\infty} \sin\left(\frac{n\pi}{H} x\right) \sin\left(\frac{n\pi}{H} d\right). \quad (7.21)$$

Dies kann leicht durch Integration der rechten Seite von (7.21) von 0 bis H und unter Berücksichtigung der Dirichlet-Bedingung verifiziert werden. Um unser Problem (7.11) zu lösen, brauchen wir noch die partiellen Ableitungen von $v(x, t)$:

$$v_t(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} \dot{v}_n(t) \sin\left(\frac{n\pi}{H}x\right), \quad (7.22)$$

$$v_{xx}(x, t) = - \sum_{n=1}^{\infty} v_n(t) \left(\frac{n\pi}{H}\right)^2 \sin\left(\frac{n\pi}{H}x\right). \quad (7.23)$$

Einsetzen von (7.20), (7.22) und (7.23) in unser Wärmeleitproblem (7.11) führt auf

$$\sum_{n=1}^{\infty} \left[\dot{v}_n(t) + D \left(\frac{n\pi}{H}\right)^2 v_n(t) - \frac{2}{H} q(t) \sin\left(\frac{n\pi}{H}d\right) - \frac{2(-1)^n}{n\pi} \dot{\theta}_2(t) \right] \sin\left(\frac{n\pi}{H}x\right) = 0. \quad (7.24)$$

Damit diese Summe für alle $x \in [0, H]$ verschwindet, müssen bereits die Ausdrücke in den eckigen Klammern jeweils Null sein. Es gilt also:

$$\dot{v}_n(t) + D \left(\frac{n\pi}{H}\right)^2 v_n(t) = \frac{2}{H} q(t) \sin\left(\frac{n\pi}{H}d\right) + \frac{2(-1)^n}{n\pi} \dot{\theta}_2(t). \quad (7.25)$$

Wir erhalten somit für jedes n eine gewöhnliche, inhomogene DGL erster Ordnung zur Bestimmung der $v_n(t)$ mit den Anfangsbedingungen

$$v_n(0) = \frac{2}{H} \int_0^H v(x, 0) \sin\left(\frac{n\pi}{H}x\right) dx = \frac{2}{H} \int_0^H [\Phi(x) - w(x, 0)] \sin\left(\frac{n\pi}{H}x\right) dx. \quad (7.26)$$

Das erste Integral über die Funktion $\Phi(x)$ ergibt offensichtlich den Fourierkoeffizienten Φ_n . Das zweite Integral über die Funktion $w(x, t)$ können wir mit (7.15) und unserem Resultat (7.18) weiter auswerten. Ein kurze Rechnung ergibt

$$v_n(0) = \Phi_n - \frac{2}{n\pi} [\theta_1 - (-1)^n \theta_2(0)]. \quad (7.27)$$

Wir wollen nun (7.25) mit der Methode der Greenschen Funktionen lösen und setzen dafür $a_n = D(n\pi/H)^2 := n^2/t_0$, wobei $t_0 := H^2/\pi^2 D$ die charakteristische Wärmediffusionszeit ist. Wir erhalten damit

$$\left(\frac{d}{dt} + a_n\right) v_n(t) = \bar{K}_n(t). \quad (7.28)$$

Die zugehörige retardierte Greensche Funktion $g_n(t, t')$ bekommen wir dann als Lösung von

$$\left(\frac{d}{dt} + a_n\right) g_n(t, t') = \delta(t - t') \Rightarrow g_n(t, t') = \Theta(t - t') e^{-a_n(t-t')}. \quad (7.29)$$

Dies ist durch einsetzen leicht zu überprüfen. Mit Hilfe der Greenschen Funktion $g_n(t, t')$ können wir sofort die partikuläre Lösung $v_n^p(t)$ angeben, es ist

$$v_n^p(t) = \int_0^t \bar{K}_n(t') e^{-a_n(t-t')} dt'. \quad (7.30)$$

Die homogene Lösung dieser DGL erster Ordnung ist einfach $v_n^h(t) = v_n(0) \exp(-a_n t)$. Durch die Addition beider Lösungsteile haben wir die Fourierkoeffizienten für unsere Entwicklung von $v(x, t)$ gefunden. Sie lauten:

$$v_n(t) = \left[v_n(0) + \int_0^t \bar{K}_n(t') e^{n^2 \frac{t'}{t_0}} dt' \right] e^{-n^2 \frac{t}{t_0}} := b_n(t) e^{-n^2 \frac{t}{t_0}}. \quad (7.31)$$

Unter Verwendung von (7.12) können wir schließlich die Lösung von (7.11) formulieren:

$$\begin{aligned} v(x, t) &= \sum_{n=1}^{\infty} b_n(t) \sin\left(\frac{n\pi}{H} x\right) e^{-n^2 \frac{t}{t_0}} \\ &= \sum_{n=1}^{\infty} \int_0^t q(t') \frac{2}{H} \sin\left(\frac{n\pi}{H} x\right) \sin\left(\frac{n\pi}{H} d\right) e^{-n^2 \frac{t-t'}{t_0}} dt' \\ &\quad + \sum_{n=1}^{\infty} \int_0^t \frac{2(-1)^n}{n\pi} \dot{\theta}_2(t') \sin\left(\frac{n\pi}{H} x\right) e^{-n^2 \frac{t-t'}{t_0}} dt' \\ &\quad + \sum_{n=1}^{\infty} v_n(0) \sin\left(\frac{n\pi}{H} x\right) e^{-n^2 \frac{t}{t_0}}. \end{aligned} \quad (7.32)$$

Um letztlich unser Ausgangsproblem (7.8) für $\theta(x, t)$ zu lösen, müssen wir lediglich noch die stationäre Lösung $w(x, t)$ des homogenen Wärmeleitproblems zu $v(x, t)$ addieren.

7.4. Stationäre Lösung des inhomogenen Problems

Wir wollen in diesem Abschnitt den quasi stationären Fall unserer Lösung $\theta(x, t) = v(x, t) + w(x, t)$ betrachten, deren Komponenten in (7.15) und (7.32) gegeben sind. Es wird unter anderem damit möglich sein die QB-Temperatur im Gleichgewicht zu ermit-

teln. Im Grenzübergang großer Zeiten t verschwindet der Ausdruck⁴ $\exp(-n^2 t/t_0)$ und die zeitabhängige Temperatur $\theta_2(t)$ des BEOL nimmt ihren stationären Wert θ_2 an. Nach (7.15) und (7.32) folgt dann:

$$\theta(x, t) = \theta_1 + \frac{x}{H} (\theta_2 - \theta_1) + \sum_{n=1}^{\infty} \int_0^t q(t') \frac{2}{H} \sin\left(\frac{n\pi}{H} x\right) \sin\left(\frac{n\pi}{H} d\right) e^{-n^2 \frac{t-t'}{t_0}} dt'. \quad (7.33)$$

Die Zeitabhängigkeit von $q(t)$ in unserem Quellterm (7.7) ist eine Folge der Zeitabhängigkeit der Temperatur in der aktiven Schicht um $x = d$, weshalb wir im stationären Fall schreiben können $q(t) = Q[T(t)] = Q(T)$. Gl. (7.33) lautet somit:

$$\theta(x, t) = \theta_1 + \frac{x}{H} (\theta_2 - \theta_1) + \frac{2Q(T)}{H} \sum_{n=1}^{\infty} \sin\left(\frac{n\pi}{H} x\right) \sin\left(\frac{n\pi}{H} d\right) \int_0^t e^{-n^2 \frac{t-t'}{t_0}} dt'. \quad (7.34)$$

Das Integral auf der rechten Seite von (7.34) können wir nun auswerten:

$$e^{-n^2 \frac{t}{t_0}} \int_0^t e^{n^2 \frac{t'}{t_0}} dt' = e^{-n^2 \frac{t}{t_0}} \left[\frac{t_0}{n^2} e^{n^2 \frac{t'}{t_0}} - \frac{t_0}{n^2} \right] = \frac{t_0}{n^2} \left[1 - e^{-n^2 \frac{t}{t_0}} \right] \approx \frac{t_0}{n^2}.$$

Im Einklang zu unseren Überlegungen zum “Einschaltvorgang” haben wir den zweiten Summand im vorletzten Schritt vernachlässigt, weil er für $t > t_0$ exponentiell verschwindet. Die Temperatur $\theta(x, t) = \theta(x)$ ist somit unabhängig von der Zeit und es gilt:

$$\theta(x) = \theta_1 + \frac{x}{H} (\theta_2 - \theta_1) + \frac{2Q(T)t_0}{H} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sin\left(\frac{n\pi}{H} x\right) \sin\left(\frac{n\pi}{H} d\right)}{n^2}. \quad (7.35)$$

Da wir uns nun insbesondere für die Temperatur $\theta(d) = T$ der aktiven Schicht interessieren, erhalten wir für diese durch die Setzung $x = d$ in (7.35) schließlich das folgende Fixpunktproblem:

$$T = \theta_1 + \frac{d}{H} (\theta_2 - \theta_1) + \frac{2Q(T)t_0}{H} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sin^2\left(\frac{n\pi}{H} d\right)}{n^2}. \quad (7.36)$$

Diese noch für alle QB gültigen Lösungen werden wir im Kap. 9.1 für einen speziellen Nanotransistor auswerten.

⁴Diesen Vorgang bezeichnen wir als das “Abklingen des Einschaltvorgangs”, da der zugehörige Summand in Gl. (7.32) für die zeitliche Entwicklung des Gesamtprozesses lediglich zu Beginn eine Rolle spielt, um dann im Laufe der Zeit exponentiell zu verschwinden.

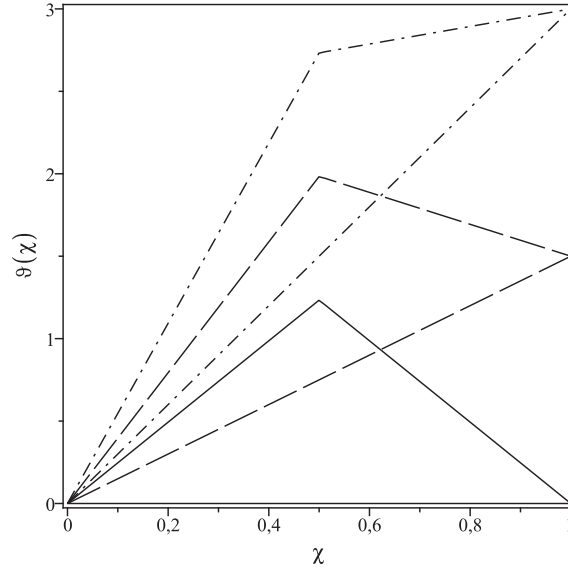


Abb. 7.2.: Normiertes Temperaturprofil $\vartheta(\chi)$, als Funktion des normierten Ortes χ für verschiedene, normierte Temperaturdifferenzen der Reservoirs: $\vartheta_2 = 0$ (durchgezogen), $\vartheta_2 = 1, 5$ (gestrichelt) und $\vartheta_2 = 3$ (gestrichpunktet). Die Wärmequelle (FEOL) befindet sich exakt in der Mitte des Systems bei $\delta = 1/2$. Die Temperatur $\Theta = \vartheta(\delta)$ der QB nimmt mit wachsendem Temperaturunterschied ϑ_2 zu. Ist $Q(T) = 0$, zeigt das System jeweils ein einfaches lineares Temperaturprofil.

Zuvor schauen wir uns jedoch die allgemeinen Eigenschaften dieser Ergebnisse an, welche den Gleichgewichtszustand des Systems beschreiben. Um der Vielzahl verschiedener Parameter Herr zu werden, führen wir neue dimensionslose Variablen und Parameter ein:

$$\delta := \frac{d}{H}, \quad \chi := \frac{x}{H}, \quad \vartheta(\chi) := \frac{H[\tilde{\theta}(\chi) - (1 - \chi)\theta_1]}{2Q(T)t_0}, \quad \vartheta_2 := \frac{H\theta_2}{2Q(T)t_0}, \quad (7.37)$$

mit $\delta \in [0, 1]$ und $\chi \in [0, 1]$. Verwenden wir diese Definitionen nun in (7.35), erhalten wir

$$\vartheta(\chi) = \vartheta_2 \chi + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sin(n\pi\chi) \sin(n\pi\delta)}{n^2}, \quad (7.38)$$

worin wir nur noch zwei dimensionslose Parameter festlegen müssen. Das δ beschreibt den Ort der Quelle relativ zur Gesamthöhe des Systems und ϑ_2 die Temperaturdifferenz zwischen beiden Reservoirs (vgl. Abb. 7.1). In Abb. 7.2 ist das stationäre, normierte

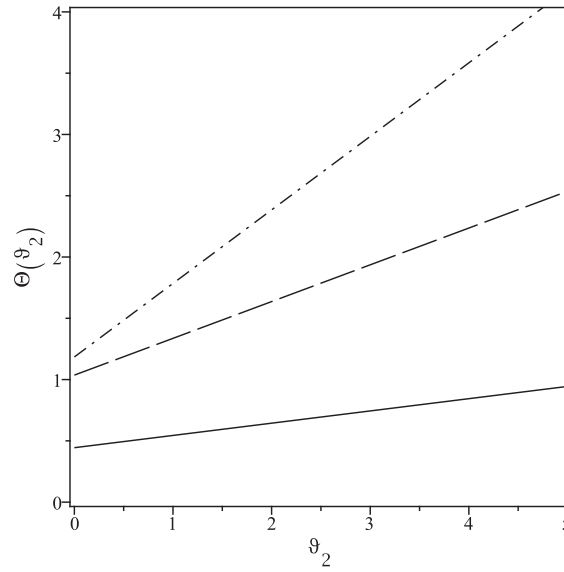


Abb. 7.3.: Normierte QB-Temperatur $\Theta(\vartheta_2)$ für verschiedene normierte Quellorte (FEOL): $\delta = 0, 1$ (durchgezogen), $\delta = 0, 3$ (gestrichelt) und $\delta = 0, 6$ (gestrichpunktet). Im grundsätzlich linearen Verhalten von $\Theta(\vartheta_2)$ hängen sowohl der Anstieg, als auch der Ordinaten Schnittpunkt von δ , dem Ort der Quelle, ab.

Temperaturprofil in Abhängigkeit des normierten Ortes χ und für verschiedene Temperaturdifferenzen ϑ_2 der Reservoirs dargestellt. Die aktive Schicht (FEOL) befindet sich dabei exakt in der Mitte des Chips ($\delta = 1/2$). Liefern die Quellen keine Wärme, ist also $Q(T) = 0$, so finden wir als stationäres einfach ein lineares Temperaturprofil. Dieses beschreibt nach dem Fourierschen Gesetz einen konstanten Wärmefluss vom wärmeren zum kälteren Wärmereservoir. Erzeugen die Quellen hingegen Wärme, erhöht sich die Temperatur im Zentrum des Chips deutlich und der Gesamtwärmestrom teilt sich in zwei unterschiedliche Teilströme. Für $\vartheta_2 = 0$ und $\vartheta_2 = 1, 5$ ist die Quellschicht (FEOL) wärmer als die zwei Reservoirs, so dass die ebenfalls konstanten Wärmeströme nun unterschiedliche Richtungen und für $\vartheta_2 = 1, 5$ auch unterschiedliche Beträge aufweisen. Im dritten Fall $\vartheta_2 = 3$ ist das zweite Reservoir (BEOL) sogar der wärmste Teil im System, wodurch die Wärme hier zum FEOL fließt. Die FEOL-Temperatur Θ als Funktion der Temperaturdifferenz ϑ_2 ist in Abb. 7.3 gezeigt. Grundsätzlich zeigt die Temperatur $\Theta(\vartheta_2)$ ein lineares Verhalten. Die Stärke der Temperaturänderung $\Delta\Theta$ in Abhängigkeit der Änderung der Temperaturdifferenz $\Delta\vartheta_2$ ist aber offensichtlich vom Ort der Quelle abhängig. Um das etwas genauer zu untersuchen, haben wir in Abb. 7.4 die Temperatur

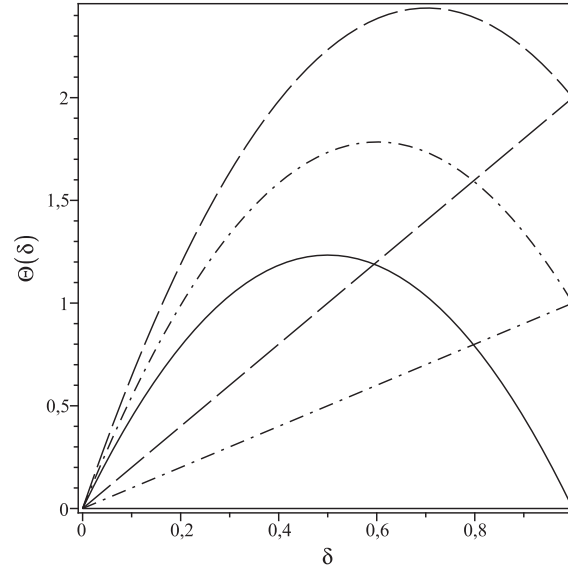


Abb. 7.4.: Normierte QB-Temperatur $\Theta(\delta)$ für verschiedene Temperaturdifferenzen der Reservoirs: $\vartheta_2 = 0$ (durchgezogen), $\vartheta_2 = 1$ (gestrichpunktet) und $\vartheta_2 = 2$ (gestrichelt). Die Temperaturmaxima von $\Theta(\delta)$ wandern für wachsendes ϑ_2 gegen das wärmere Reservoir.

Θ der aktiven Schicht als Funktion ihrer Lage im Chip gezeigt. Ist die Temperaturdifferenz zwischen den Reservoirs $\vartheta_2 = 0$, ist Θ exakt in der Mitte des Chips maximal. Bei zunehmendem ϑ_2 wandert das Maximum in Richtung des wärmeren Reservoirs. Das Maximum befindet sich dann an der Stelle $\delta_{max} > 1/2$, welche sich entsprechend der üblichen Maximumsbedingung aus (7.38) ergibt. Um bei gegebenen ϑ_2 ein niedrigeres Θ und damit eine niedrige QB-Temperatur zu erreichen, muss die Lage δ der aktiven Schicht größer oder kleiner sein als δ_{max} . Dabei sind im Intervall $[2\delta_{max} - 1, 1]$ gleichermaßen niedrige QB-Temperaturen erreichbar, unabhängig davon, welchem Reservoir sich die aktive Schicht nähert. Die niedrigsten QB-Temperaturen Θ sind jedoch nur dann zu erreichen, wenn die Chiparchitektur so konstruiert wird, dass sich die aktive Schicht im Intervall $[0, 2\delta_{max} - 1]$ befindet und dabei der Kühlungseinheit möglichst nahe kommt.

Nach dieser Diskussion besteht nun die letzte Aufgabe in der Bestimmung der QB-Temperaturen, welche sich aus den Lösungen des Fixpunktproblems (7.36) ergeben. Aus physikalischer Sicht sind wir aber nicht an allen möglichen, sondern lediglich an den zeitlich stabilen Fixpunkten interessiert, da nur diese im Hinblick auf die thermischen Fluktuationen eine stabile QB-Temperatur ergeben.

8. Stabilitätsuntersuchung der Fixpunkte

8.1. Linearisierung der Temperaturlösung

Ausgehend von unserer Temperaturlösung (7.32) für den Chip, betrachten wir die Temperatur $\theta(d, t) := T(t)$ der aktiven Schicht für zeitunabhängige Randwerte θ_1 und θ_2 ¹, wobei der “Einschaltvorgang” ($t \gg t_0$) erneut als abgeklungen angesehen wird. Es gilt dann:

$$T(t) = \theta_1 + \frac{d}{H} (\theta_2 - \theta_1) + \sum_{n=1}^{\infty} \int_0^t dt' \frac{2}{H} \sin^2 \left(\frac{n\pi}{H} d \right) e^{-n^2 \frac{t-t'}{t_0}} q[T(t')]. \quad (8.1)$$

Wir sind nun im Besonderen an dem Verhalten unseres Systems in der Nähe einer der Fixpunkte T^* interessiert, da diese Temperatur von unserem System im Gleichgewicht angenommen wird. Mit Hilfe der kleinen und zeitabhängigen Temperaturänderung $\tau(t)$ können wir dann die temperaturabhängigen Terme in (8.1) durch die folgenden Linearisierungen ersetzen:

$$T(t) = T^* + \tau(t) \quad \text{und} \quad q[T(t)] = Q(T^*) + \frac{dQ(T^*)}{dT} \tau(t). \quad (8.2)$$

Durch die Einführung dieser Entwicklungen für die Funktionen $T(t)$ und $q[T(t)]$ lässt sich (8.1) in eine Bestimmungsgleichung für $\tau(t)$ umformen. Sie lautet

$$\tau(t) = \frac{2}{H} \frac{dQ(T^*)}{dT} \sum_{n=1}^{\infty} \sin^2 \left(\frac{n\pi}{H} d \right) \int_0^t dt' e^{-n^2 \frac{t-t'}{t_0}} \tau(t'), \quad (8.3)$$

¹Der allgemeinere Fall einer zeitabhängigen RB $\theta_2(t)$ kann analog behandelt werden.

wobei wir hier ausgenutzt haben, dass

$$T^* = \theta_1 + \frac{d}{H} (\theta_2 - \theta_1) + \frac{2Q(T^*)t_0}{H} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sin^2(n\pi d/H)}{n^2} \quad (8.4)$$

dem stationären Fixpunktproblem entspricht. Die Gl. (8.3) beschreibt im Prinzip die zeitliche Entwicklung von $\tau(t)$, ist aber in der gegebenen Form nur schwer zu analysieren. Wir werden uns daher in den nächsten Abschnitten mit einer geeigneten Näherung von (8.3) auseinandersetzen, welche uns dann in die Lage versetzt, den Einfluss einer kleinen Temperaturänderung $\tau(t)$ auf die Stabilität der Fixpunkte T^* zu analysieren.

8.2. Stabilitätsuntersuchung

Damit sich für die QB stabile Gleichgewichtstemperaturen einstellen, müssen die möglichen Fixpunktlösungen zeitlich stabil sein. Diese wesentliche Eigenschaft hängt maßgeblich von der zeitlichen Entwicklung von $\tau(t)$ ab, da T^* nur dann als feste QB-Temperatur angenommen wird, wenn $\tau(t)$ mit der Zeit verschwindet: $\tau(t) \rightarrow 0$ für $t \rightarrow \infty$. Wie wir im Folgenden zeigen können, lässt sich die zeitliche Entwicklung von $\tau(t)$ mit Hilfe einer gewöhnlichen Differentialgleichung (DGL) beschreiben. Im Ergebnis führt uns die Analyse der Lösungen dieser DGL zu einer konkreten Stabilitätsbedingung, welche das für Stabilität notwendige Verhältnis zwischen erzeugter und dissipierter Wärme im System formalisiert.

Methode der Taylorentwicklung

Um eine Aussage über die zeitliche Stabilität der Fixpunkte und damit über die Temperatur des Systems machen zu können, betrachten wir nun das Integral in Gl. (8.3) genauer. Die Exponentialfunktion im Integranden hat dabei die in Abb. 8.1 gezeigten Eigenschaften, wobei wir zur Darstellung die dimensionslosen Größen $\hat{t} := t'/t$ und $\hat{t}_{0,n} := t_0/t n^2$ eingeführt haben.² Für $t_0 \rightarrow 0$ ist der Integrand fast im gesamten Integrationsintervall von 0 bis t nahezu Null. Lediglich in der Nähe der oberen Integrationsgrenze t können wir einen relevanten Beitrag zum Integral erwarten. Das legt nahe, dass wir $\tau(t')$ nur in einer kleinen Umgebung von t zu berücksichtigen haben. Hierzu entwickeln wir $\tau(t')$ in eine Taylorreihe um t , wobei wir voraussetzen, dass sie existiert und einen von Null

²Es ist hier zu beachten, dass t' die Variable ist und t ein fester Zeitpunkt.

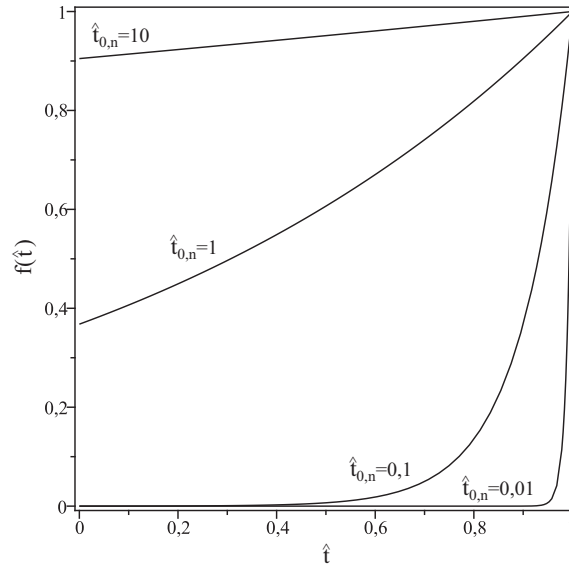


Abb. 8.1.: Darstellung des Verhaltens von $f(\hat{t}) = \exp\left(-(1-\hat{t})/\hat{t}_{n,0}\right)$ für verschiedene Werte von $\hat{t}_{n,0}$.

verschiedenen Konvergenzradius besitzt. Es gilt:

$$\tau(t') = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} \left. \frac{d^k \tau(t')}{dt'^k} \right|_{t'=t} (t' - t)^k. \quad (8.5)$$

Verwenden wir diesen Ausdruck im Integral von Gl. (8.3) und vertauschen Integration und Summation so erhalten wir

$$I = \int_0^t dt' \tau(t') e^{-n^2 \frac{t-t'}{t_0}} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} \frac{d^k \tau(t)}{dt'^k} \int_0^t dt' e^{\gamma(t'-t)} (t' - t)^k. \quad (8.6)$$

Wir haben hierbei in der Exponentialfunktion $(t-t') = -(t'-t)$ und $\gamma := n^2/t_0$ gesetzt. Für das Integral auf der rechten Seite bekommen wir dann

$$\begin{aligned} \int_0^t dt' \frac{d^k}{d\gamma^k} e^{\gamma(t'-t)} &= \frac{d^k}{d\gamma^k} e^{-\gamma t} \int_0^t dt' e^{\gamma t'} = \frac{d^k}{d\gamma^k} e^{-\gamma t} \left[\frac{1}{\gamma} e^{\gamma t'} \right]_0^t \\ &= \frac{d^k}{d\gamma^k} \left[\frac{1}{\gamma} - \frac{1}{\gamma} e^{-\gamma t} \right] \approx \frac{d^k}{d\gamma^k} \frac{1}{\gamma} = (-1)^k \frac{k!}{\gamma^{k+1}}. \end{aligned}$$

Es ließ sich auch dabei wieder die Bedingung $t \gg t_0$ ausnutzen, die wir schon als Begründung für das Abklingen des “Einschaltvorgangs” verwendet haben. Als Näherung für Gl. (8.6) können wir dann schreiben:

$$I \approx \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{\gamma^{k+1}} \frac{d^k \tau(t)}{dt'^k} = \frac{1}{n^2} \tau(t) t_0 - \frac{1}{n^4} \frac{d\tau(t)}{dt} t_0^2 + \frac{1}{n^6} \frac{d^2 \tau(t)}{dt^2} t_0^3 - \dots \quad (8.7)$$

In Anh. B.2 zeigen wir, dass sich dieses Ergebnis auch alternativ über die wiederholte Anwendung der Methode der partiellen Integration gewinnen lässt. Brechen wir nun diese Entwicklung nach dem kleinen Parameter t_0 für $k \geq 3$ ab, können wir Gl. (8.3) als eine homogene DGL zweiter Ordnung formulieren. Wir bekommen

$$\tau(t) = \frac{2}{H} \frac{dQ(T^*)}{dT} \sum_{n=1}^{\infty} \sin^2 \left(\frac{n\pi}{H} d \right) \left[\frac{1}{n^2} \tau(t) t_0 - \frac{1}{n^4} \frac{d\tau(t)}{dt} t_0^2 + \frac{1}{n^6} \frac{d^2 \tau(t)}{dt^2} t_0^3 \right], \quad (8.8)$$

$$\Rightarrow \tau(t) = a_1 \tau(t) - a_2 \frac{d\tau(t)}{dt} + a_3 \frac{d^2 \tau(t)}{dt^2}, \quad (8.9)$$

mit den folgenden Abkürzungen:

$$a_m := \frac{2t_0^m}{H} \frac{dQ(T^*)}{dT} \alpha_m, \quad (8.10)$$

wobei $m = 0, 1, \dots$ und $\alpha_m := \sum_{n=1}^{\infty} [\sin(n\pi d/H) / n^m]^2$ ist. Gl. (8.9) ermöglicht es uns nun, die Funktion $\tau(t)$ zu berechnen und deren zeitliche Entwicklung zu untersuchen. Dafür wollen wir zwei grundsätzliche Fälle betrachten. Als Erstes soll a_3 klein gegenüber a_2 sein, so dass wir den Term zweiter Ordnung in (8.9) vernachlässigen können. Wir finden dann

$$\frac{d\tau(t)}{dt} = \frac{a_1 - 1}{a_2} \tau(t) = k\tau(t). \quad (8.11)$$

Dieser Fall ist von besonderem Interesse, da er auf das Newtonsche Abkühlungsgesetz führt, insofern für die Abkühlungskonstante

$$k = \frac{\alpha_1}{\alpha_2 t_0} \left(1 - \frac{H}{2t_0 \alpha_1} \left[\frac{dQ(T^*)}{dT} \right]^{-1} \right) < 0 \quad (8.12)$$

gilt.³ Ohne Beschränkung der Allgemeinheit betrachten wir eine kleine Störung der Gleichgewichtstemperatur T^* zum Zeitpunkt $t_A = 0$, so dass wir als Anfangsbedingung (AB) $\tau(0) = \tau_0$ setzen können. Dann ist die Lösung von Gl. (8.11) einfach durch $\tau(t) = \tau_0 \exp(kt)$ gegeben. Dies ergibt einen stabilen Fixpunkt T^* für $k < 0$. Denn unter dieser Bedingung kehrt unser System für jede kleine Störung τ_0 im Laufe der Zeit exponentiell zum Ausgangszustand zurück.

Um zu untersuchen, ob die Ordnung der Entwicklung von $\tau(t)$ einen Einfluss auf die noch explizit abzuleitende Stabilitätsbedingung hat, berücksichtigen wir für den zweiten Fall jetzt alle Terme in Gl. (8.9). Der Term zweiter Ordnung ist damit als eine Korrektur zu (8.11) aufzufassen. Es folgt dann eine DGL zweiter Ordnung:

$$\frac{d^2\tau(t)}{dt^2} - \delta \frac{d\tau(t)}{dt} + \omega\tau(t) = 0. \quad (8.13)$$

Wir haben hier von den Definitionen $\delta := a_2/a_3 > 0$ und $\omega := (a_1 - 1)/a_3$ Gebrauch gemacht.⁴ Die allgemeine Lösung dieser Gleichung lässt sich durch $\tau(t) = A \exp(k_1 t) + B \exp(k_2 t)$ mit $k_{1/2} = (\delta/2) \pm \sqrt{(\delta/2)^2 - \omega}$ aufschreiben (vgl. hierzu auch Anh. B.3). Für einen stabilen Fixpunkt brauchen wir erneut $\tau(t \rightarrow \infty) = 0$. Wie eine Analyse der allgemeinen Lösung in Anh. B.3 zeigt, kann diese Forderung nur für die speziellen AB $\tau(0) = \tau_0$ und $\dot{\tau}(0) = k_2 \tau_0$ mit $k_2 < 0$ erfüllt werden. Unter diesen Bedingungen folgt die Lösung $\tau(t) = \tau_0 \exp(k_2 t)$ ebenfalls dem Newtonschen Abkühlungsgesetz, jedoch mit einer anderen Abkühlungskonstante k_2 . Wenn nun aber a_3 klein ist, können wir die Quadratwurzel in der Definition von k_2 entwickeln und erhalten $k \approx k_2$. Beide Fälle zeigen also im Stabilitätsbereich einen exponentiellen Abfall von $\tau(t)$ für $t \rightarrow \infty$. Diese Eigenschaft entspricht dem Verhalten eines Relaxators, was typisch ist für diffusive Systeme [81, S. 39].

Schließlich bleiben noch die Forderungen $k < 0$ sowie $k_2 < 0$ auszuwerten. Dafür muss in beiden Fällen $\omega < 0$ sein. Nach den Definitionen in (8.11) und (8.13) ist dies nur für $0 \leq a_1 < 1$ erfüllbar. Aus Gl. (8.10) und $Q(T) = U_2 I(T)/\rho A c_V$, $t_0 = H^2/\pi^2 D$ sowie

³Das System kühlt sich hierbei auf die Umgebungstemperatur T_U ab, welche in diesem Fall gleich Null ist.

⁴Wir haben die Größen in Anlehnung an die häufig verwendete Nomenklatur bei Schwingungsproblemen gewählt. Sie dienen hier lediglich der Analyse der Lösungen von (8.13) und sind von früheren Definitionen in dieser Arbeit zu differenzieren. In diesem Sinn ist es bemerkenswert, dass Gl. (8.13) eine entdämpfte Schwingung der Temperatur um T^* repräsentiert.

Tab. 8.1.: Verhalten der veränderlichen Größen im System in der Nähe eines stabilen Fixpunkts T^* . Bei Vorgabe der Spannung U_2 und unter Berücksichtigung der linken Seite von $0 \leq a_1 < 1$ folgen die möglichen Änderungen von I und T , woraus sich die Änderungen in den erzeugten und dissipierten Wärmemengen pro Zeiteinheit (\dot{Q}_e und \dot{Q}_d) ergeben. Aus der rechten Seite von $0 \leq a_1 < 1$ resultieren dann die zugehörigen Stabilitätsbedingungen.

Spannung	Änderung I	Änderung T	\dot{Q}_e	\dot{Q}_d	Ergebnis
$U_2 > 0$	$dI > 0$	$dT > 0$	$\dot{Q}_e \nearrow$	$\dot{Q}_d \nearrow$	stabil, wenn $ d\dot{Q}_e < d\dot{Q}_d $
	$dI < 0$	$dT < 0$	$\dot{Q}_e \searrow$	$\dot{Q}_d \searrow$	stabil, wenn $ d\dot{Q}_e < d\dot{Q}_d $
$U_2 < 0$	$dI > 0$	$dT < 0$	$\dot{Q}_e \searrow$	$\dot{Q}_d \searrow$	stabil, wenn $ d\dot{Q}_e < d\dot{Q}_d $
	$dI < 0$	$dT > 0$	$\dot{Q}_e \nearrow$	$\dot{Q}_d \nearrow$	stabil, wenn $ d\dot{Q}_e < d\dot{Q}_d $

$D = \lambda/\rho c_V$ folgt dann die zentrale Stabilitätsbedingung

$$\left| \frac{dI(T^*)}{dT} \right| < \frac{\pi^2}{2\alpha_1} \frac{\sigma}{|U_2|}, \quad (8.14)$$

in der wir $\sigma = \lambda A/H$ gesetzt haben. Die Ungleichung (8.14) beschränkt den zulässigen Verlauf des Anstiegs von $I(T)$ im Punkt $(T^*, I(T^*))$ und legt damit die maximale Stärke der erlaubten Stromänderung als Reaktion auf eine Temperaturstörung fest. Zeigt das System gute Wärmeleiteigenschaften, repräsentiert durch σ , sowie nur kleine Spannungen U_2 , so ist das System auch für stärker veränderliche Ströme $I(T)$ stabil. Im umgekehrten Fall können nur schwach veränderliche Ströme einen stabilen Fixpunkt T^* ergeben.

Wir können (8.14) aber auch anschaulich interpretieren, indem wir uns wieder eine kleine Störung des Gleichgewichtszustands T^* vorstellen. Die resultierende kleine Temperaturänderung dT verursacht sowohl eine kleine Änderung in der erzeugten Wärme pro Zeiteinheit $d\dot{Q}_e := U_2 dI(T^*)$, als auch in der dissipierten Wärme pro Zeiteinheit $d\dot{Q}_d := (\pi^2/2\alpha_1)\sigma dT$. Dieser Anschauung nach beschreibt dann die Bedingung (8.14) das Verhältnis zwischen der Änderung der erzeugten Wärme und der Änderung der dissipierten Wärme, welches erfüllt sein muss, damit ein stabiler Fixpunkt T^* vorliegt. Angenommen die Störung besteht aus einer kleinen Temperaturerhöhung und führt zu einer Erhöhung der erzeugten Wärme ($dI(T^*)/dT > 0$, $U_2 > 0$), dann muss diese betragsmäßig kleiner sein, als die Wärme die das System unter diesen Bedingungen abtransportieren

kann. Ist dies gegeben, so reagiert das FEOL mit einem kurzfristigen Temperaturanstieg, der aber wie gezeigt exponentiell auf das Ausgangsniveau T^* zurückkehrt. In Tab. 8.1 sind die möglichen Reaktionen des Systems zusammengefasst. Die dabei auftretenden Änderungen sind immer auf den Gleichgewichtszustand T^* bezogen. Wir sehen, dass sich in allen möglichen Fällen die selbe Stabilitätsbedingung ergibt, welche durch Umformung direkt auf (8.14) führt.

9. Das Quantenbauelement als ein Nanotransistor

In diesem Kapitel soll nun das bisher unspezifizierte QB durch einen Nanotransistor repräsentiert werden. Dies ist eine interessante Anwendung, da die Entwicklungen in der Halbleiterforschung einen weiter anhaltenden Trend zu immer kleineren Bauelementen zeigen. Mittlerweile werden FET hergestellt, deren Gate-Längen in einem Bereich von 10 nm oder sogar darunter liegen [82–87]. In solchen Transistoren ist der Elektronenstrom, zusätzlich zum klassischen, durch quantenmechanischen und ballistischen Transport geprägt. Der deutlichste Quanteneffekt ist dabei das Source-Drain-Tunneln [88, 89] durch die im Kanal befindliche Potenzialbarriere (vgl. Abb. 9.1). Der daraus resultierende Strom lässt sich für kleine Gate-Spannungen unterhalb einer sog. Schwellspannung beobachten und wäre aus klassischer Drift-Diffusion-Sicht nicht erlaubt. Das im folgenden Abschnitt präsentierte quasi-eindimensionale, effektive Transistormodell in Verbindung mit den Ergebnissen aus den vorangegangenen Abschnitten erlaubt es uns, ein thermo-elektrisches Modell eines idealisierten Chips zu konstruieren. Wie sich zeigt, führt dies, in Erweiterung unserer Erkenntnisse aus den Kapn. 7 und 8, auf ein Standard-Fixpunktproblem. Dessen Lösungen ermöglichen die Bestimmung der Temperatur der aktiven Schicht (FEOL) und damit der Transistortemperatur. Eine entsprechende Darstellung des Problems wurde auch in sehr elementaren Betrachtungen zum nicht quantenmechanischen Transport im Bipolartransistor [77–79] und im FET [80] gefunden.

9.1. Der Nanotransistor

Wir wenden unser thermisches Modell aus Kap. 7 auf den in Abb. 9.1 dargestellten Nanotransistor an, indem wir für die dissipierte Spannung U_2 die angelegte Drain-Spannung U_D verwenden. Weiter wird der Einfachheit halber der im Mittel dissipier-

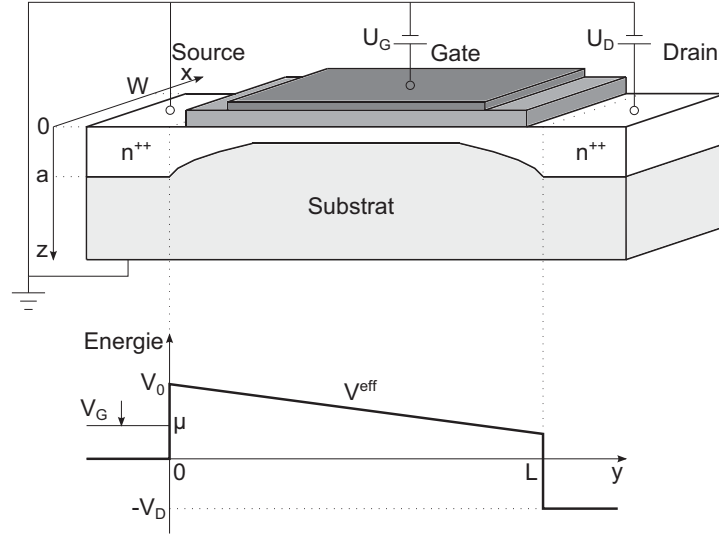


Abb. 9.1.: Oben: Schematische Darstellung der wichtigsten Teile eines n-Kanal Nano-FET. Unten: Darstellung des eindimensionalen, effektiven Potentials V^{eff} , von dem man annimmt, dass es linear über den Kanalbereich zwischen Source- und Drain-Kontakt abfällt. Grafik in Anlehnung an [90].

te Strom $I(T)$ mit dem Drain-Strom $I_D(T)$ gleichgesetzt.¹ Vernachlässigen wir jegliche Leckströme über den Gate-Kontakt, können wir die Gate-Spannung U_G als einen externen Parameter betrachten. Ausgehend von dem in Abb. 9.1 dargestellten dreidimensionalen Transportproblem lässt sich weiter ein eindimensionales, effektives Transistormodell ableiten [89]. Der damit berechnete Drain-Strom liefert eine bemerkenswert gute qualitative Beschreibung der experimentellen Kurven [90]. Im Rahmen dieses Modells kann dann der normierte Drain-Strom j pro Transistorbreite W bestimmt werden. Für ihn gilt $j(v_D, u) = \hat{I}_D(v_D, u)/(W J_0)$, worin J_0 eine systemspezifische Normierungskonstante² ist. Folgen wir der Darstellung der Theorie in Ref. [90], ist der normierte Strom j gegeben durch

$$j(v_D, u) = (m(u) - v_G) \int_0^\infty d\hat{\epsilon} [s(u, \hat{\alpha}_S[u]) - s(u, \hat{\alpha}_D[u, v_D])] \tilde{T}(\hat{\epsilon}). \quad (9.1)$$

¹Durch diese Maßnahme überschätzen wir den dissipierten Strom $I(T)$ und damit die erzeugte Wärme. In der Folge werden auch die Bauteiltemperaturen $T = \theta(d)$ überschätzt. Um die tatsächliche elektrische Leistung zu bestimmen, sind die eigentlichen Schaltvorgänge im Transistor zu betrachten und geeignet zu mitteln.

²In einem sehr breiten n-Kanal Transistor auf Si-Basis, mit stark dotierten Kontakten, beträgt die Normierungskonstante $J_0 = 5.4 \times 10^4 \mu\text{A}/\mu\text{m}$ (vgl. [90]).

Hierbei sind $v_{D/G} = V_{D/G}/\epsilon_F = U_{D/G}e/\epsilon_F$ die auf die Fermienergie ϵ_F normierten elektrostatischen Potenziale und $m(u) = \mu(u)/\epsilon_F$ das normierte chemische Potenzial, als Funktion der normierten Temperatur $u = (k_B/\epsilon_F)T$. Für das chemische Potential in den Kontakten gilt

$$m(u) = uX_{\frac{1}{2}}\left(\frac{4}{3\sqrt{\pi}}u^{-3/2}\right). \quad (9.2)$$

Mit $s(u, \hat{\alpha}_s)$ bezeichnen wir weiter die sog. Supply-Funktion, wobei $s = S$ im Source-Kontakt und $s = D$ im Drain-Kontakt zu setzen sind. Im Falle eines sehr breiten Transistors ist sie gegeben durch

$$s(u, \hat{\alpha}_s) = \sqrt{\frac{u}{4\pi}}F_{-\frac{1}{2}}\left([v_G - m(u)]\frac{\hat{\alpha}_s}{u}\right). \quad (9.3)$$

Darin finden wir, die ebenfalls von der normierten Temperatur u abhängigen Größen $\hat{\alpha}_s(u)$, welche wie folgt definiert sind:

$$\hat{\alpha}_S(u) = \hat{\epsilon} - \frac{m(u)}{m(u) - v_G} \quad \text{und} \quad \hat{\alpha}_D(u, v_D) = \hat{\epsilon} - \frac{m(u) - v_D}{m(u) - v_G}. \quad (9.4)$$

Bei der in Gl. (9.3) auftretenden Funktion $F_{-\frac{1}{2}}(x)$ handelt es sich um das Fermi-Dirac Integral der Ordnung $j = -1/2$. Es lässt sich allgemein schreiben als

$$F_j(x) = \frac{1}{\Gamma(j+1)} \int_0^\infty dt \frac{t^j}{1 + e^{t-x}}. \quad (9.5)$$

Die Umkehrfunktion von $F_{\frac{1}{2}}(x)$ bezeichnen wir mit $X_{\frac{1}{2}}(x)$, welche in Gl. (9.2) zu finden ist. Als letzte und für das Transportproblem wichtigste Funktion haben wir in Gl. (9.1) die effektive Stromtransmission $\tilde{T}(\hat{\epsilon})$ mit $\hat{\epsilon} = (E - E_x)/V_0$ als die normierte Energie der Elektronen in der y - z -Richtung. Die z -Abhängigkeit von $\hat{\epsilon}(y, z)$ werden wir dabei im Folgenden durch die “Single-Mode Approximation” (SMA) behandeln, in der wir voraussetzen, dass in z -Richtung nur das unterste Energieniveau besetzt ist [89–93]. Wie aus Ref. [89] hervorgeht, ist die Energie der Elektronen in x -Richtung nach $E_x = E_x^0 N_x^2$ mit $N_x = 1, 2, \dots$ zu bestimmen. In Abb. 5 von Ref. [90] sind die Drain-Stromkennlinien $j(v_D, v_G)$ für verschiedene Parameter v_G in einem Transistor mit einer Gate-Länge von $L = 10$ nm gezeigt. Für die von außen vorgegebenen QB-Temperaturen wurden dort $u = 0, 1$ und $u = 0, 01$ betrachtet. Für die Fermi-Energie im Source-Kontakt wurde $\epsilon_F = 0.35$ eV gesetzt.

Wir wollen nun diese Theorie für unsere Zwecke adaptieren und den Drain-Strom $j(u)$ als Funktion der normierten Temperatur u im Nanotransistor berechnen. Die dafür notwendigen effektiven Stromtransmissionen

$$\tilde{T}(\hat{\epsilon}) = \hat{k}_D(\hat{\epsilon}) |\hat{t}^S(\hat{\epsilon})|^2 \hat{k}_S(\hat{\epsilon})^{-1} \quad (9.6)$$

können aus den Streulösungen (vgl. Anh. B.4) der eindimensionalen Schrödingergleichung gewonnen werden. Bei diesen Streuwellen handelt es sich um ebene, in den Kontakten definierte Wellen. Sie laufen sowohl aus der Drain-Richtung, als auch aus der Source-Richtung ein und werden am Potenzial des Kanalbereichs des Transistors gestreut. Dabei werden sie in transmittierte und reflektierte Anteile zerlegt, die durch die Koeffizienten $\hat{t}^{S/D}$ und $\hat{r}^{S/D}$ charakterisiert werden. Die zugehörige Schrödingergleichung lautet in ihrer skalierten Form nach Anh. B.4

$$\left[-\frac{1}{\beta} \frac{d^2}{d\hat{y}^2} + \hat{v}(\hat{y}) - \hat{\epsilon} \right] \hat{\psi}(\hat{y}, \hat{\epsilon}) = 0, \quad (9.7)$$

wobei $\beta = 2m^*V_0L^2/\hbar^2$ und $\hat{y} = y/L$ ist. Das skalierte effektive Potenzial erhalten wir, indem wir den in Abb. 9.1 dargestellten Potenzialverlauf zusätzlich auf V_0 normieren (siehe auch Gl. (B.18) im Anhang). Es ist dann

$$\hat{v}(\hat{y}) = \frac{V^{eff}(y)}{V_0} = \begin{cases} 0 & \text{für } \hat{y} < 0, \\ 1 - \hat{v}_D \hat{y} & \text{für } 0 \leq \hat{y} \leq 1, \\ -\hat{v}_D & \text{für } \hat{y} > 1. \end{cases} \quad (9.8)$$

Die Stromtransmission durch eine beliebig gegebene Potenzialbarriere (Streugebiet) ist im Allgemeinen nur numerisch berechenbar. Zur Lösung von eindimensionalen Problemen haben wir im Anh. B.4 einen einfachen rekursiven Algorithmus angegeben. Auf Basis der resultierenden Transmissionen erhalten wir dann nach (9.1) die in Abb. 9.2 dargestellten Ströme in Abhängigkeit der normierten Temperatur u . Es wurden dabei $\beta = 100$ und $v_D = 1,0$ gewählt und der Gate-Parameter v_G variiert. In jedem der drei Fälle wächst der Strom $j(u)$ mit steigender Temperatur u an, was auf die zunehmende thermische Aktivierung der Elektronenzustände zurückzuführen ist.

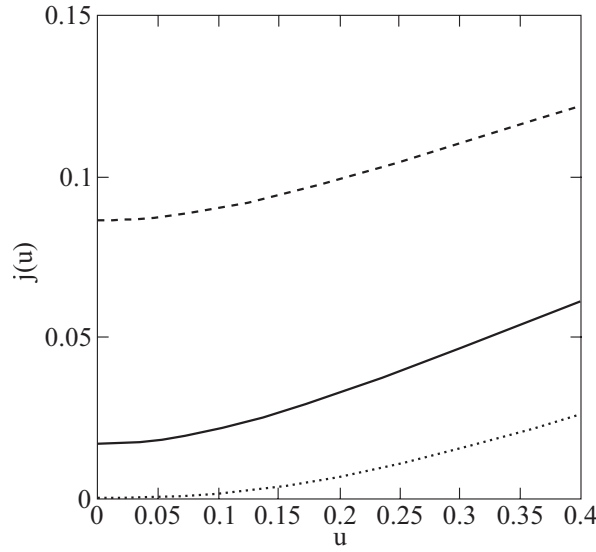


Abb. 9.2.: Der normierte Strom $j(u)$ in Abhängigkeit der normierten Temperatur u für die Parameter $\beta = 100$ und $v_D = 1, 0$. Der Gate-Parameter wurde dabei variiert: $v_G = -0,4$ (gepunktet), $v_G = 0,0$ (durchgezogen) und $v_G = 0,4$ (gestrichelt).

9.2. Das Standard-Fixpunktproblem für einen Nanotransistor

Durch Multiplikation mit k_B/ϵ_F kann die Fixpunktgleichung (7.36) in eine dimensionslose Standardform (vgl. z. B. [94, S. 35] und [95]) gebracht werden. In einem ersten Schritt erhalten wir dadurch

$$u = \bar{u}_e + \frac{k_B}{\epsilon_F} \frac{2\hat{Q}(u)t_0}{H} \alpha_1, \quad (9.9)$$

wobei α_1 wie in Gl. (8.10) definiert ist. Darüber hinaus beschreibt $\bar{u}_e = k_B[\theta_1 + (d/H)(\theta_2 - \theta_1)]/\epsilon_F$ die normierte effektive Umgebungstemperatur, welche sich aus dem gewichteten Mittel $[(H - d)\theta_1 + d\theta_2]/H$ der beiden Randtemperaturen ergibt.³ Substituieren wir in

³Die Umgebung in unserem Modell, bestehend aus zwei Wärmereservoirs auf verschiedenen Temperaturen θ_1 und θ_2 , wird durch eine effektive Umgebung ersetzt, in der beide Reservoirs die gleiche normierte Temperatur \bar{u}_e haben.

Gl. (9.9) $Q(T) = U_D I_D(T) / \rho A c_V$, $t_0 = H^2 / \pi^2 D$ sowie $D = \lambda / \rho c_V$ folgt

$$u = \bar{u}_e + \frac{2\alpha_1 k_B H U_D}{\pi^2 \epsilon_F A \lambda} \hat{I}(u). \quad (9.10)$$

Mit Hilfe unserer Setzungen des vorhergehenden Abschnitts, also $U_D = v_D \epsilon_F / e$ und $\hat{I}(u) = J_0 W j(u)$, geht (9.10) weiter in

$$u = \bar{u}_e + \frac{2\alpha_1 k_B H W J_0 v_D}{\pi^2 e A \lambda} j(u) \quad (9.11)$$

über. Wir definieren nun die Packungsdichte P der Transistoren auf dem Chip. Wir führen dazu die charakteristische Fläche des Transistors ein, die gegeben ist durch das Produkt WL aus Gate-Länge L und Transistorbreite W . Die charakteristische Fläche setzen wir anschließend in das Verhältnis zur Fläche A des zugeordneten Volumens ΔV (vgl. auch Abb. 7.1), also $P := WL/A$. Zudem verwenden wir noch den spezifischen Wärmewiderstand ρ_{th} , der sich als das Reziproke der spezifischen Wärmeleitfähigkeit $\rho_{th} = 1/\lambda$ darstellen lässt und erhalten dann

$$u = \bar{u}_e + \frac{2\alpha_1 k_B H P J_0 v_D \rho_{th}}{\pi^2 e L} j(u). \quad (9.12)$$

Es bietet sich hier an, eine Normierung des spezifischen Wärmewiderstands ρ_{th} festzulegen. Wir setzen dazu

$$r = \frac{\rho_{th}}{\rho_{th}^0} \quad \text{mit} \quad \rho_{th}^0 = \frac{\pi^2 e L}{2\alpha_1 k_B H P J_0 v_D}. \quad (9.13)$$

Dieser Ausdruck stellt im Fall von $L \ll W \ll H$ eine gute Näherung dar. Unser Fixpunktproblem (7.36) geht damit in die besagte dimensionslose Standardform über, wie sie z. B. in [94, S. 35] oder [95] zu finden ist. Für sie gilt schließlich

$$u = \bar{u}_e + r j(u) \equiv F(u), \quad (9.14)$$

wobei dann die Stabilitätsbedingung (8.14) mit Hilfe der gleichen Substitutionsschritte und unter Verwendung von $dF(u)/du = r dj(u)/du$ die folgende Form annimmt:

$$\left| \frac{dF(u)}{du} \right| < 1. \quad (9.15)$$

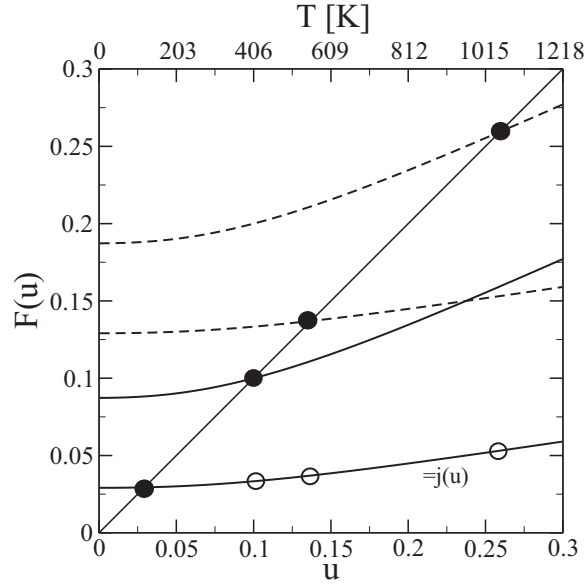


Abb. 9.3.: Darstellung von $F(u)$ bei einer effektiven Umgebungstemperatur von $\bar{u}_e = 0$ (≈ 0 K) und bei einem normierten spezifischen Wärmewiderstand von $r = 1$ (untere durchgezogene Linie) bzw. $r = 3$ (obere durchgezogene Linie). Analog dazu $F(u)$ bei einer effektiven Umgebungstemperatur von $\bar{u}_e = 0, 1$ (≈ 406 K) und gleichen Widerständen (gestrichelte Linien). Die Schnittpunkte mit der Geraden u sind durch die schwarzen Kreise hervorgehoben und ergeben die stationären Temperaturwerte u^* . Die Projektion dieser Werte auf die Kurve $F(u) = j(u)$ für $\bar{u}_e = 0$ und $r = 1$ liefert die stationären Stromwerte im Transistor.

Wir können (9.14) prinzipiell als eine stationäre Version des Fourierschen Gesetzes interpretieren, wenn wir im Gleichgewicht fordern, dass die erzeugte Wärme ($\propto j(u)$) gleich der abtransportierten Wärme ist. Auf diese Weise lässt sich (9.14) auch in äquivalenter Form durch den zugehörigen Wärmestrom ausdrücken, wodurch diese Gleichung dann die Gestalt des stationären Fourierschen Gesetzes annimmt.

In Abb. 9.3 haben wir die Funktion $j(u)$ für den Gate-Spannungsparameter $v_G = 0, 1$ und den Drain-Spannungsparameter $v_D = 1, 0$ berechnet. Aus ihr können wir dann mit (9.14) die Funktion $F(u)$ bestimmen, deren Schnittpunkte mit der Geraden u die normierten stationären Temperaturen u^* ergeben. Offensichtlich ist der Anstieg von $F(u)$ im dargestellten Bereich kleiner als der Anstieg von u , welcher gerade Eins ist. Es folgt somit aus Gl. (9.15), dass alle Fixpunkte stabil sind. Ferner bekommen wir bei einer effektiven Umgebungstemperatur von $\bar{u}_e = 0$ (0 K) und einem normierten spezifischen

Wärmewiderstand von $r = 1$ die Transistortemperatur $u^* = 0,03$ (≈ 121 K). Erhöht sich der spezifische Wärmewiderstand auf $r = 3$, steigt die Transistortemperatur auf $u^* = 0,1$ (≈ 406 K). Ein ähnlich deutlicher Anstieg in der Transistortemperatur wird auch gefunden, wenn die Umgebungstemperatur als $\bar{u}_e = 0,1$ (≈ 406 K) gewählt wird. Wie anhand der ungefüllten Kreise in Abb. 9.3 ebenfalls zu sehen ist, geht die signifikante Erhöhung der Transistortemperatur bei wachsendem spezifischen Widerstand mit einer Erhöhung des Drain-Stroms einher, welcher aber deutlich weniger stark ausgeprägt ist.

10. Zusammenfassung II

Wir haben in diesem Teil der Arbeit ein einfaches semi-analytisches Modell zur Beschreibung der thermischen Eigenschaften integrierter Schaltkreise entwickelt, welche in ihre Chipumgebung eingebettet sind. Dazu war das eindimensionale, inhomogene Wärmeleitproblem zu lösen, das sich aus der typischen Chipstruktur ergab und auf der thermodynamischen Kontinuitätsgleichung beruht. Diese Betrachtung erlaubte es uns die Temperatur eines beliebigen QB zu bestimmen. Sie ergibt sich als ein stabiler Fixpunkt T^* eines Fixpunktproblems, für das wir eine zugehörige Stabilitätsbedingung formulieren konnten. Aus einer allgemeinen Analyse der stationären Lösung konnten wir einige grundlegende Erkenntnisse über die QB-Temperatur gewinnen. Es zeigte sich, dass sowohl die QB-Temperatur, als auch das Aufheizen des QB bei variablen Umgebungstemperaturen signifikant von der Lage der aktiven Schicht im Chip und damit von der Chiparchitektur abhängt. Niedrige QB-Temperaturen erhält man dabei, wenn sich die aktive Schicht möglichst nahe an einer der beiden Reservoirs befindet. Bis zu einem gewissen Grad ist es dabei unerheblich, welches der beiden Reservoirs dazu verwendet wird. Erst für Orte $\chi < 2\delta_{max} - 1$ stellt es sich als günstiger heraus, die aktive Schicht näher an der Kühlungsschicht zu platzieren (vgl. Abb. 7.4).

Im Anschluss wendeten wir diese Ergebnisse auf einen speziellen Nanotransistor an, für den es möglich war das Fixpunktproblem in der Standardform aufzuschreiben. Für das sich ergebende gekoppelte thermo-elektrische Transportproblem konnten wir auf Basis eines einfachen rekursiven Algorithmus den Drain-Strom als Funktion der Temperatur numerisch berechnen. Im Ergebnis zeigte sich ein mit der Temperatur relativ schwach monoton wachsender Strom, als Folge der zunehmenden thermischen Aktivierung der Elektronen. Mit der Bestimmung des Drain-Stroms war es dann weiter möglich die Transistortemperatur in Abhängigkeit der effektiven Umgebungstemperatur sowie des normierten Wärmewiderstands zu untersuchen. Alle dabei gefundenen Fixpunkte und damit die QB-Temperaturen waren in dem von uns betrachteten Bereich stabil. Die sich einstellenden QB-Temperaturen wachsen dabei erwartungsgemäß an, wenn die

effektive Umgebungstemperatur oder der thermische Widerstand im System erhöht werden.

Aufgrund der einfachen Struktur unseres thermo-elektrischen Systems, ist es relativ schnell möglich die Betrachtungen auf komplexere elektronische Umgebungen auszuweiten. Dies kann z.B. durch das Hinzufügen von Lastwiderständen in den Verstärkerschaltungen (vgl. Abb. 7.1) geschehen. Wir erwarten ebenfalls, dass sich strukturähnliche Fixpunktgleichungen auch für komplexere thermische Umgebungen, in die die aktive Schicht eingebettet ist, formulieren lassen.

Anhang A.

Ergänzende Berechnungen I

A.1. Greensche Matrix im eindimensionalen System

In diesem Abschnitt des Anhangs werden die relevanten Matrizen abgeleitet, welche in die Stromtransmission (3.1) einfließen. Basis dafür ist der allgemeine Formalismus, der z. B. in den Refs. [6, S. 39–45] und [12] angegeben ist. Wir beginnen mit der dynamischen Matrix (2.5)

$$[D]_{i,j} = D_{i,j} = \frac{1}{\sqrt{M_i M_j}} \left(\frac{\partial^2 V}{\partial u_i \partial u_j} \right)_{\underline{R}^0}. \quad (\text{A.1})$$

Hier ist M_i die Masse des i -ten Atoms und u_i seine Auslenkung aus der Gleichgewichtslage. Der Vektor \underline{R}^0 beinhaltet dabei alle Gleichgewichtskoordinaten der Atome und der Vektor \underline{u} alle zugehörigen Auslenkungskoordinaten. Für eine eindimensionale Struktur und NNWw nimmt das zugrunde liegende Kristallpotenzial die Form

$$V(\underline{u}) = \frac{1}{2} \sum_{i=-\infty}^{\infty} f_i (u_{i+1} - u_i)^2 \quad (\text{A.2})$$

an, wodurch die dynamische Matrix die folgende Gestalt hat:

$$D_{i,j} = \begin{cases} -f_{i-1}/\sqrt{M_i M_{i-1}} & \text{für } j = i - 1, \\ (f_{i-1} + f_i)/\sqrt{M_i M_i} & \text{für } j = i, \\ -f_i/\sqrt{M_i M_{i+1}} & \text{für } j = i + 1, \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases} \quad (\text{A.3})$$

Diese Tridiagonalmatrix kann in der üblichen Vorgehensweise in Submatrixblöcke unterteilt werden. Es gilt:

$$[D] = \begin{bmatrix} D_1 & \tau_1^+ & 0 \\ \tau_1 & D_D & \tau_2 \\ 0 & \tau_2^+ & D_2 \end{bmatrix}. \quad (\text{A.4})$$

Hierin beschreibt die Matrix $[D_D]_{i,j}$ ($i, j \in [1, N]$, vgl. auch Abb. 3.1) die dynamischen Eigenschaften des Devices, während die semiinfiniten Matrizen $[D_s]$ die dynamischen Verhältnisse in den Kontaktregionen $s = 1, 2$ repräsentieren. Diese drei Systemkomponenten sind gekoppelt durch die $(N \times \infty)$ -dimensionalen Kopplungsmatrizen

$$[\tau_1]_{i,j} = t_1 \delta_{i,1} \delta_{j,0} \quad \text{für } 1 \leq i \leq N, j \leq 0 \quad (\text{A.5})$$

und

$$[\tau_2]_{i,j} = t_2 \delta_{i,N} \delta_{j,N+1} \quad \text{für } 1 \leq i \leq N, j \geq N+1. \quad (\text{A.6})$$

Die Matrixelemente t_s sind dabei durch $t_1 = f_0 / \sqrt{M_{C1} M_1}$ und $t_2 = f_N / \sqrt{M_N M_{C2}}$ gegeben. Die Selbstenergiematrizen können in ihrer allgemeinen Form ausgedrückt werden durch

$$[\Sigma_s(\omega)] = [\tau_s][g_s(\omega)][\tau_s]^+. \quad (\text{A.7})$$

In diesem Matrixprodukt bezeichnen wir mit $[g_s(\omega)] = [(\omega + i0^+)^2 I - D_s]^{-1}$ die Green-schen Matrizen der ungekoppelten Kontakte. Sie sind in unserem eindimensionalen Fall durch die Ausdrücke in den Gln. (3.5) und (3.6) gegeben. Dies eingesetzt in (A.7) können wir die Selbstenergiematrizen berechnen und finden:

$$[\Sigma_s(\omega)]_{i,j} = (\delta_{1,s} \delta_{i,1} \delta_{j,1} + \delta_{2,s} \delta_{i,N} \delta_{j,N}) t_s^2 g_s(\omega). \quad (\text{A.8})$$

Verwenden wir weiter die allgemeine Definition der Gammamatrix

$$[\Gamma_s(\omega)] = i[\Sigma_s(\omega) - \Sigma_s^+(\omega)], \quad (\text{A.9})$$

bekommen wir schließlich im eindimensionalen Fall der atomaren Oszillatorkette

$$[\Gamma_s(\omega)]_{i,j} = (\delta_{1,s} \delta_{i,1} \delta_{j,1} + \delta_{2,s} \delta_{i,N} \delta_{j,N}) \gamma_s(\omega). \quad (\text{A.10})$$

Die hier noch auftretenden Funktionen $\gamma_s(\omega)$ haben wir im Zusammenhang mit Gl. (3.7) eingeführt.

Zum Ende dieses Abschnitts zeigen wir noch, dass für (3.10) eine Taylorreihe existiert, die ausschließlich gerade Entwicklungskoeffizienten besitzt. Zuerst einmal stellt (3.10) lediglich eine, wenn auch komplizierte Komposition analytischer Funktionen dar. Die Transmission (3.10) ist dann ebenfalls analytisch und besitzt damit eine Potenzreihenentwicklung, die im Bereich der reellen Zahlen identisch ist mit der Taylorreihe. Weiterhin gilt für (3.10)

$$\gamma_s(-\omega) = iC_s[g_s(-\omega) - g_s^*(-\omega)] = iC_s[g_s^*(\omega) - g_s(\omega)] = -\gamma_s(\omega), \quad (\text{A.11})$$

was bedeutet, dass die $\gamma_s(\omega)$ ungerade Funktionen sind und somit $\gamma_1(\omega)\gamma_2(\omega)$ eine gerade Funktion ergibt. Weiter kann man mit den Definitionen aus Kap. 3 leicht zeigen, dass $m_N(-\omega) := \det[M_N(-\omega)] = \det[M_N^*(\omega)] = m_N^*(\omega)$ Gültigkeit besitzt. Dann ist

$$|m_N(-\omega)|^2 = m_N(-\omega)m_N^*(-\omega) = m_N^*(\omega)m_N(\omega) = |m_N(\omega)|^2 \quad (\text{A.12})$$

und folglich $\Xi(\omega)$ eine gerade Funktion. Die zugehörige Entwicklung um $\omega = 0$ hat dann gemeinhin nur gerade Entwicklungsterme.

A.2. Stromtransmission für kleine Frequenzen

Um den Grenzwert $\Xi(\omega \rightarrow 0) = \Xi_0$ zu bestimmen, betrachten wir Gl. (3.10) und entwickeln die auftretenden Funktionen jeweils für sich bis zur ersten Ordnung um $\omega = 0$. Für die Funktionen $\gamma_{1/2}(\omega)$ erhalten wir direkt

$$\gamma_1(\omega) \approx \omega_1^{\max} \frac{M_{C1}}{M_1} \omega \quad \text{und} \quad \gamma_2(\omega) \approx \omega_2^{\max} \frac{M_{C2}}{M_N} \omega \quad (\text{A.13})$$

und somit

$$\gamma_1(\omega)\gamma_2(\omega) \approx \omega_1^{\max} \omega_2^{\max} \frac{M_{C1}}{M_1} \frac{M_{C2}}{M_N} \omega^2. \quad (\text{A.14})$$

Die Taylorentwicklung von $\det[M_N(\omega)] = m_N(\omega)$ erfordert etwas mehr Aufwand. Als Erstes entwickeln wir $m_N(\omega)$ entlang der Elemente der letzten Zeile und gewinnen die

folgende rekursive Darstellung der Determinante:

$$m_N(\omega) = a_N(\omega)m_{N-1}(\omega) - b_{N-1}^2 m_{N-2}(\omega), \quad (\text{A.15})$$

mit $m_{-1}(\omega) = 0$ und $m_0(\omega) = 1$. Hierbei ist für ein KDK-System nur $N \geq 2$ sinnvoll. In (A.15) ist $m_{N-1}(\omega)$ die Subdeterminante, welche übrig bleibt, nachdem wir die letzte Zeile und die letzte Spalte in der Matrix $[M_N(\omega)]$ gestrichen haben. Der Index $N - 1$ zeigt dabei an, dass die ursprüngliche Dimension von $[M_N(\omega)]$ um Eins reduziert wurde. Analog bekommen wir $m_{N-2}(\omega)$ durch nochmaliges streichen der letzten Zeile und Spalte in der Matrix, die der Determinante $m_{N-1}(\omega)$ zu Grunde liegt. Zusätzlich entwickeln wir die Determinanten $m_{N-1}(\omega)$ und $m_{N-2}(\omega)$ entlang der ersten Zeile. Dann können wir rekursiv schreiben:

$$m_{N-1}(\omega) = a_1(\omega)n_{N-2}(\omega) - b_1^2 n_{N-3}(\omega), \quad (\text{A.16})$$

$$m_{N-2}(\omega) = a_1(\omega)\bar{n}_{N-3}(\omega) - b_1^2 \bar{n}_{N-4}(\omega). \quad (\text{A.17})$$

Die Determinanten $n_L(\omega)$ und $\bar{n}_L(\omega)$ enthalten nicht mehr die speziellen ECKelemente $a_1(\omega)$ und $a_N(\omega)$, worauf wir später noch zurückgreifen. Nun haben wir für die Reihenentwicklung von $m_N(\omega)$ um $\omega = 0$ erst einmal $m_N(0)$ zu berechnen. Dafür setzen wir in Gl. (3.2) $\omega = 0$ und benutzen die rekursive Darstellung (A.15) für die Determinante $m_{N-q}(0)$, in welcher wir die letzten $q < N$ Zeilen und Spalten gestrichen haben. Für $N - q = 1, 2, 3$ folgt damit

$$\begin{aligned} m_1(0) &= a_1(0)m_0(0) - b_0^2 m_{-1}(0) = -\frac{f_1}{M_1}, \\ m_2(0) &= a_2(0)m_1(0) - b_1^2 m_0(0) = \frac{f_1 f_2}{M_1 M_2}, \\ m_3(0) &= a_3(0)m_2(0) - b_2^2 m_1(0) = -\frac{f_1 f_2 f_3}{M_1 M_2 M_3}. \end{aligned}$$

Natürlich vermuten wir an dieser Stelle, dass $m_j(0)$ für $1 \leq j < N$ die allgemeine Form

$$m_j(0) = (-1)^j \prod_{i=1}^j \frac{f_i}{M_i} \quad (\text{A.18})$$

hat. Wir wollen diese Behauptung durch vollständige Induktion beweisen. Nehmen wir an, dass die Behauptung für j wahr ist, dann bekommen wir für $j + 1$

$$\begin{aligned}
m_{j+1}(0) &= a_{j+1}(0)m_j(0) - b_j^2 m_{j-1}(0) \\
&= -\frac{f_j + f_{j+1}}{M_{j+1}} (-1)^j \prod_{i=1}^j \frac{f_i}{M_i} - \frac{(-1)^{j-1} f_j^2}{M_j M_{j+1}} \prod_{i=1}^{j-1} \frac{f_i}{M_i} \\
&= (-1)^j \left[-\frac{f_j}{M_{j+1}} \prod_{i=1}^j \frac{f_i}{M_i} - \prod_{i=1}^{j+1} \frac{f_i}{M_i} + \frac{f_j}{M_{j+1}} \prod_{i=1}^j \frac{f_i}{M_i} \right] \\
&= (-1)^{j+1} \prod_{i=1}^{j+1} \frac{f_i}{M_i}.
\end{aligned}$$

Daraus folgt, dass (A.18) wahr ist für alle $j < N$, mit N aus den natürlichen Zahlen. Jetzt können wir $m_N(0)$ berechnen. Es gilt:

$$\begin{aligned}
m_N(0) &= a_N(0)m_{N-1}(0) - b_{N-1}^2 m_{N-2}(0) \\
&= -\frac{f_{N-1}}{M_N} (-1)^{N-1} \prod_{i=1}^{N-1} \frac{f_i}{M_i} - \frac{(-1)^{N-2} f_{N-1}^2}{M_{N-1} M_N} \prod_{i=1}^{N-2} \frac{f_i}{M_i} \\
&= (-1)^N \left[\frac{f_{N-1}}{M_N} \prod_{i=1}^{N-1} \frac{f_i}{M_i} - \frac{f_{N-1}}{M_N} \prod_{i=1}^{N-1} \frac{f_i}{M_i} \right] = 0.
\end{aligned}$$

Somit verschwindet der Term nullter Ordnung in unserer Entwicklung. Für die nächst höhere Ordnung leiten wir Gl. (A.15) nach ω ab und erhalten an der Stelle $\omega = 0$

$$\frac{dm_N}{d\omega} = m_{N-1} \frac{da_N}{d\omega} + a_N \frac{dm_{N-1}}{d\omega} - b_{N-1}^2 \frac{dm_{N-2}}{d\omega}, \quad (\text{A.19})$$

wobei wir auf die Darstellung des Arguments $\omega = 0$ zu Gunsten einer kompakteren und übersichtlicheren Darstellung verzichtet haben. In dieser Gleichung müssen wir die Ausdrücke $dm_{N-1}(0)/d\omega$ und $dm_{N-2}(0)/d\omega$ weiter auswerten. Um dies zu tun, nutzen wir (A.16) und (A.17), woraus folgt

$$\frac{dm_{N-1}}{d\omega} = n_{N-2} \frac{da_1}{d\omega} + a_1 \frac{dn_{N-2}}{d\omega} - b_1^2 \frac{dn_{N-3}}{d\omega}, \quad (\text{A.20})$$

$$\frac{dm_{N-2}}{d\omega} = \bar{n}_{N-3} \frac{da_1}{d\omega} + a_1 \frac{d\bar{n}_{N-3}}{d\omega} - b_1^2 \frac{d\bar{n}_{N-4}}{d\omega}. \quad (\text{A.21})$$

Die auftretenden Determinanten $n_L(\omega)$ und $\bar{n}_L(\omega)$ sind Polynome vom Grad $2L$, deren Ableitungen an der Stelle $\omega = 0$ verschwinden. Dadurch erhalten wir für Gl. (A.19) die Form

$$\frac{dm_N}{d\omega} = m_{N-1} \frac{da_N}{d\omega} + [a_N n_{N-2} - b_{N-1}^2 \bar{n}_{N-3}] \frac{da_1}{d\omega}. \quad (\text{A.22})$$

Nutzen wir jetzt unsere Definitionen für $n_L(\omega)$ und $\bar{n}_L(\omega)$, ist es einfach zu zeigen, dass der Ausdruck in den eckigen Klammern eine der möglichen Entwicklungen der Determinante $\bar{m}_{N-1}(\omega)$ ist. Dabei ist $\bar{m}_{N-1}(\omega)$ die Subdeterminante, welche entsteht, wenn wir in der Matrix $[M_N(\omega)]$ jeweils die erste Zeile und Spalte streichen. Wir können also die Ableitung $dm_N(0)/d\omega$ darstellen durch

$$\frac{dm_N(0)}{d\omega} = \bar{m}_{N-1}(0) \frac{da_1(0)}{d\omega} + m_{N-1}(0) \frac{da_N(0)}{d\omega}. \quad (\text{A.23})$$

Analog zu Gl. (A.18) ist auch $\bar{m}_j(\omega)$ berechenbar. Der Beweis erfolgt auch hier über die vollständige Induktion. Dies führt auf

$$\bar{m}_j(0) = (-1)^j \prod_{i=N-j+1}^N \frac{f_{i-1}}{M_i} \quad \text{mit } j \leq N-1. \quad (\text{A.24})$$

Ausgehend von (A.18) und (A.24) finden wir für $\bar{m}_{N-1}(0)$ und $m_{N-1}(0)$ den Zusammenhang

$$M_1 m_{N-1}(0) = M_N \bar{m}_{N-1}(0). \quad (\text{A.25})$$

Schließlich bleibt noch die Berechnung der Ableitungen der Elemente $a_1(\omega)$ und $a_N(\omega)$ an der Stelle $\omega = 0$. Wir erhalten

$$\frac{da_1(0)}{d\omega} = i \frac{M_{C1}}{2M_1} \omega_1^{max} \quad \text{und} \quad \frac{da_N(0)}{d\omega} = i \frac{M_{C2}}{2M_N} \omega_2^{max}, \quad (\text{A.26})$$

worin wir die Dispersionsrelationen $k_s(\omega) = (2/d_s) \arcsin(\omega/\omega_s^{max})$ ausgenutzt haben (vgl. Abs. 3.1). Mit (A.25) und (A.26) können wir für Gl. (A.23) schreiben:

$$\frac{dm_N(0)}{d\omega} = i \frac{m_{N-1}(0)}{2M_N} [M_{C1} \omega_1^{max} + M_{C2} \omega_2^{max}]. \quad (\text{A.27})$$

Wir verfügen nun über alles Nötige für die Entwicklung bis zur ersten Ordnung von $m_N(\omega)$ um $\omega = 0$. Speziell für $|m_N(\omega)|^2$ finden wir die nachstehende Darstellung:

$$|m_N(\omega)|^2 = \frac{m_{N-1}(0)^2}{4M_N^2} [M_{C1}\omega_1^{max} + M_{C2}\omega_2^{max}]^2 \omega^2. \quad (\text{A.28})$$

Der letzte Schritt unserer Herleitung besteht darin (A.14) und (A.28) sowie

$$C = \prod_{i=1}^{N-1} \frac{f_i^2}{M_i M_{i+1}} = \frac{M_1}{M_N} \prod_{i=1}^{N-1} \frac{f_i^2}{M_i^2} = \frac{M_1}{M_N} m_{N-1}(0)^2 \quad (\text{A.29})$$

in Gl. (3.10) einzusetzen, was für $\Xi(\omega \rightarrow 0)$ resultiert in

$$\Xi_0 = \frac{4M_{C1}\omega_1^{max}M_{C2}\omega_2^{max}}{[M_{C1}\omega_1^{max} + M_{C2}\omega_2^{max}]^2} = \frac{4\sqrt{M_{C1}f_{C1}}\sqrt{M_{C2}f_{C2}}}{[\sqrt{M_{C1}f_{C1}} + \sqrt{M_{C2}f_{C2}}]^2}. \quad (\text{A.30})$$

Mit der Setzung $y := M_{C2}f_{C2}/M_{C1}f_{C1}$ erhalten wir schließlich das universelle Ergebnis (3.12).

A.3. Taylorentwicklung von Gleichung (3.33)

Setzen wir in Gl. (3.33) die Substitution $z := 1/\beta$, mit $z \rightarrow 0$ für $\beta \rightarrow \infty$, ein, so ist

$$\lambda_h(z) = z \left(e^{-z} - 1 \right)^{-1} - \frac{2}{z} \text{dilog}(e^z) := \lambda_1(z) - \frac{2}{z} \lambda_2(z). \quad (\text{A.31})$$

Die Funktion $\lambda_1(z)$ ist nicht definiert für $z = 0$, aber kontinuierlich fortsetzbar. Denn mit der Regel von l'Hospital gilt:

$$\lim_{z \rightarrow 0} \lambda_1(z) = \lim_{z \rightarrow 0} \frac{1}{-e^{-z}} = -1. \quad (\text{A.32})$$

Dann ist es möglich die Funktion $\lambda_1(z)$ in eine Taylorreihe um $z = 0$ zu entwickeln. Durch erneute Anwendung der Regel von l'Hospital bekommen wir für sie

$$\lambda_1(z) = -1 - \frac{1}{2}z - \frac{1}{12}z^2 + \frac{1}{720}z^4 \mp O(z^6). \quad (\text{A.33})$$

Schauen wir uns nun weiter die Funktion $\lambda_2(z)$ in (A.31) an. Für die erste Ableitung des in ihr vorkommenden Ausdrucks $\text{dilog}(e^z)$ können wir schreiben:

$$\frac{d}{dz} \text{dilog}(e^z) = \frac{ze^z}{1-e^z} = \frac{z}{e^{-z}-1} = \lambda_1(z). \quad (\text{A.34})$$

Das bedeutet, dass wir alle höheren Ableitungen von $\text{dilog}(e^z)$ bekommen, indem wir $\lambda_1(z)$ entsprechend oft ableiten. Es gilt also

$$\frac{d^n \lambda_2(z)}{dz^n} = \frac{d^{n-1} \lambda_1(z)}{dz^{n-1}} \quad \text{mit} \quad \frac{d^{-1} \lambda_1(z)}{dz^{-1}} := \text{dilog}(e^z), \quad (\text{A.35})$$

woraus sich die Entwicklungskoeffizienten für die Taylorreihe von $\lambda_2(z)$ um $z = 0$ ergeben. Damit nimmt der zweite Term auf der rechten Seite von (A.31) die folgende Form an:

$$\frac{2}{z} \lambda_2(z) = -2 - \frac{1}{2}z - \frac{1}{18}z^2 + \frac{1}{1800}z^4 \mp O(z^6). \quad (\text{A.36})$$

Nutzen wir jetzt (A.33) und (A.36) in (A.31) sowie anschließend die Substitution $z := 1/\beta$, erhalten wir schlussendlich den Hochtemperaturlimes von Gl. (3.33). Er lautet bis zur vierten Ordnung

$$\lambda_h^\infty(\beta) \approx 1 - \frac{1}{36\beta^2} + \frac{1}{1200\beta^4}. \quad (\text{A.37})$$

A.4. Asymptotische Entwicklung von Gleichung (3.33)

Als erstes betrachten wir die asymptotische Entwicklung der Dilogarithmusfunktion für ein reelles $y \geq 1$, für y geht gegen unendlich. Es gilt

$$\text{dilog}(y) = -\frac{1}{2} \ln(y)^2 - \frac{\pi^2}{6} + \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{\ln(y)}{n} + \frac{1}{n^2} \right) y^{-n}. \quad (\text{A.38})$$

Wir bekommen diese Darstellung unter Verwendung der geometrischen Reihe in der Definition des Dilogarithmus (3.34), für die wir auch schreiben können

$$\text{dilog}(y) := \int_1^y ds \frac{\ln(s)}{1-s} = \int_1^y ds \frac{\ln(1/s)}{s} \frac{1}{1-1/s}. \quad (\text{A.39})$$

Ersetzen wir $1/(1 - 1/s)$ durch $\sum_{n=0}^{\infty} (1/s)^n$, resultiert eine normal konvergente Reihe. Dadurch ist es möglich, die Summation und die Integration zu vertauschen:

$$\operatorname{dilog}(y) = \lim_{s_0^+ \rightarrow 1} \sum_{n=0}^{\infty} \int_{s_0}^y ds \ln(1/s) (1/s)^{n+1}. \quad (\text{A.40})$$

Mit der Substitution $t = 1/s$ erhalten wir für $y \geq s_0$

$$\operatorname{dilog}(y) = \lim_{s_0^+ \rightarrow 1} \sum_{n=-1}^{\infty} \int_{1/y}^{1/s_0} dt \ln(t) t^n. \quad (\text{A.41})$$

Anschließend integrieren wir über t , benutzen $\sum_{n=1}^{\infty} 1/n^2 = \pi^2/6$ und bekommen die Darstellung (A.38). Daraus folgt für (3.33) durch die Substitution $z := 1/\beta$ mit β geht gegen Null:

$$\lambda_h(z) = \frac{z}{1 - e^z} + \frac{1}{3} \frac{\pi^2}{z} - \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{2}{n} + \frac{2}{n^2 z} \right) e^{-nz}. \quad (\text{A.42})$$

Hiervon ausgehend können wir im Limes großer z näherungsweise schreiben

$$\lambda_h(z) \approx -ze^{-z} + \frac{1}{3} \frac{\pi^2}{z} - 2e^{-z} - \frac{2}{z} e^{-z} - O(e^{-2z}) \quad (\text{A.43})$$

$$\approx \frac{1}{3} \frac{\pi^2}{z} - (z + 2)e^{-z}. \quad (\text{A.44})$$

Rücksubstitution von z in der letzten Gleichung führt uns auf den Tieftemperaturlimit von $\lambda_h(\beta)$. Es ergibt sich

$$\lambda_h^0(\beta) \approx \frac{\pi^2}{3} \beta - \left(2 + \frac{1}{\beta} \right) \exp \left(-\frac{1}{\beta} \right). \quad (\text{A.45})$$

A.5. Stromtransmission für eine atomare “Double-Junction” Kette

Um Gl. (3.42) abzuleiten, benutzen wir (A.15), in welcher wir $m_{N-1}(\omega)$ und $m_{N-2}(\omega)$ durch (A.16) sowie (A.17) ersetzen. In der hier betrachteten speziellen Kette ist $b_1 = b_{N-1} = \tilde{\omega}_0^2$ und $n_L(\omega) = \bar{n}_L(\omega)$. Dies führt auf

$$m_N(\omega) = a_1 a_N n_{N-2} - \tilde{\omega}_0^4 [a_1 + a_N] n_{N-3} + \tilde{\omega}_0^8 n_{N-4}. \quad (\text{A.46})$$

Wir haben dabei auf die Darstellung der Frequenzabhängigkeit der Funktionen $a_1(\omega)$, $a_N(\omega)$ und $n_L(\omega)$ verzichtet. Bei den $n_L(\omega)$ handelt es sich um Determinanten von symmetrischen Tridiagonalmatrizen mit den Dimensionen $L = N - 2, N - 3$ und $N - 4$. Sie haben auf der Hauptdiagonale ausschließlich Elemente der Form $\omega^2 - 2\tilde{\omega}_0^2$ und auf den zwei Nebendiagonalen nur Elemente der Form $\tilde{\omega}_0^2$. In diesem Fall entsprechen die Funktionen $n_L(\omega)$ einem analytisch lösbaren Toeplitz EWP [96] mit den EW

$$\omega_{L,n}^2 = 2\tilde{\omega}_0^2 \left[1 - \cos \left(\frac{n\pi}{L+1} \right) \right] \quad \text{mit } n = 1, \dots, L. \quad (\text{A.47})$$

Aus den resultierenden Diagonalmatrizen können die Determinanten $n_L(\omega)$ sehr einfach berechnet werden. Wir bekommen

$$n_L(\omega) = \prod_{n=1}^L [\omega^2 - \omega_{L,n}^2], \quad (\text{A.48})$$

woraus sich dann (3.43) ergibt. Schließlich gewinnen wir aus (3.10) und (A.46) den analytischen Ausdruck für $\Xi(\omega)$ in Gl. (3.42).

A.6. Die Transversalmoden

Für die Transversalmoden können wir aufgrund der Homogenität in transversaler Richtung ebene Wellen ansetzen. Sie lauten

$$\begin{aligned} \Phi_{l,p}^j(md) &= A_{l,p}^j e^{ik_p md} + B_{l,p}^j e^{-ik_p md}, \\ \Phi_{l,q}^j(nd) &= A_{l,q}^j e^{ik_q nd} + B_{l,q}^j e^{-ik_q nd}, \end{aligned} \quad (\text{A.49})$$

wobei $A_{l,p/q}^j$ und $B_{l,p/q}^j$ die Amplituden in der Schicht l und $k_{p/q}$ die Wellenzahl der polarisierten Mode p/q in Richtung von $y = md$ bzw. $z = nd$ sind. Werten wir die Ableitungen in (4.5), mit Hilfe von (A.49), an den Stellen $y = 0$ und $z = 0$ aus, erhalten wir

$$\begin{aligned} A_{l,p}^j i k_p - B_{l,p}^j i k_p &= 0 \Rightarrow A_{l,p}^j = B_{l,p}^j := C_{l,p}^j, \\ A_{l,q}^j i k_q - B_{l,q}^j i k_q &= 0 \Rightarrow A_{l,q}^j = B_{l,q}^j := C_{l,q}^j. \end{aligned} \quad (\text{A.50})$$

An den Stellen $y = L_y$ und $z = L_z$ liefern die RB

$$\begin{aligned} A_{l,p}^j i k_p e^{i k_p L_y} - B_{l,p}^j i k_p e^{-i k_p L_y} &= 0 \Rightarrow \sin(k_p L_y) = 0 \Rightarrow k_p = \frac{p\pi}{L_y}, \\ A_{l,q}^j i k_q e^{i k_q L_z} - B_{l,q}^j i k_q e^{-i k_q L_z} &= 0 \Rightarrow \sin(k_q L_z) = 0 \Rightarrow k_q = \frac{q\pi}{L_z}, \end{aligned} \quad (\text{A.51})$$

mit $p, q \in \mathbb{N}$. Unter Verwendung dieser Resultate können wir die Transversalmoden (A.49) schlussendlich in der angegebenen Form (4.6) schreiben.

A.7. Die kritische Temperatur T_K

Wir betrachten zunächst den Phononenstrom J_a^\rightarrow einer akustischen Mode der vom Kontakt 1 in den Kontakt 2 fließt.¹ Für diesen gilt nach (2.25)

$$J_a^\rightarrow = \int_0^{\Omega_j} d\omega \Xi_a^j(\omega) \frac{\hbar\omega}{2\pi} N(\omega, T) = \bar{\Xi}_a^j \int_0^{\Omega_j} d\omega \frac{\hbar\omega}{2\pi} N(\omega, T). \quad (\text{A.52})$$

Hierbei haben wir auf der rechten Seite den Mittelwertsatz der Integralrechnung benutzt. Mit der üblichen Substitution $x = \hbar\omega/k_B T$ sowie der Bose-Einstein-Verteilung erhalten wir dann

$$J_a^\rightarrow = \bar{\Xi}_a^j \frac{k_B^2 T^2}{2\pi\hbar} \int_0^\infty dx \frac{x}{e^x - 1} = \bar{\Xi}_a^j \frac{k_B^2 T^2}{2\pi\hbar} \frac{\pi^2}{6}. \quad (\text{A.53})$$

Die Integrationsgrenze $x = \hbar\Omega_j/k_B T$ haben wir unter der Voraussetzung $\hbar\Omega_j \gg k_B T$ gegen ∞ laufen lassen. Analog zu den akustischen Phononen können wir auch den Strombeitrag J_o^\rightarrow der ersten auftretenden optischen Mode für wachsende T formulieren. Es ist

$$J_o^\rightarrow = \int_{\omega_G}^{\Omega_o} d\omega \Xi_o(\omega) \frac{\hbar\omega}{2\pi} N(\omega, T) = \bar{\Xi}_o \frac{k_B^2 T^2}{2\pi\hbar} \int_{\frac{\hbar\omega_G}{k_B T}}^\infty dx \frac{x}{e^x - 1}. \quad (\text{A.54})$$

Auch hier haben wir $\hbar\Omega_o \gg k_B T$ verlangt und die obere Integralgrenze gegen ∞ laufen lassen. Die Größen $\bar{\Xi}_a^j$ und $\bar{\Xi}_o$ bezeichnen wir als die effektiven Transmissionen, welche in Gl. (4.21) definiert wurden. Wir teilen nun das Integral auf der rechten Seite von

¹Um den Beitrag der Phononen zum Transport beurteilen zu können, ist es ausreichend eine der beiden möglichen Transportrichtungen zu betrachten.

Gl. (A.54) wie folgt auf

$$J_o^{\rightarrow} = \bar{\Xi}_o \frac{k_B^2 T^2}{2\pi\hbar} \frac{\pi^2}{6} - \bar{\Xi}_o \frac{k_B^2 T^2}{2\pi\hbar} \int_0^{\frac{\hbar\omega_G}{k_B T}} dx \frac{x}{e^x - 1}. \quad (\text{A.55})$$

Um zu beurteilen, ob der Beitrag der optischen Phononen gegenüber dem der akustischen Phononen vernachlässigbar ist, bilden wir nun das Verhältnis aus den Gln. (A.53) und (A.55). Es gilt mit $x_G := \hbar\omega_G/k_B T$:

$$\frac{J_o^{\rightarrow}}{J_a^{\rightarrow}} = \frac{\bar{\Xi}_o}{\bar{\Xi}_a^j} \left(1 - \frac{6}{\pi^2} \int_0^{x_G} dx \frac{x}{e^x - 1} \right) = \frac{\bar{\Xi}_o}{\bar{\Xi}_a^j} \kappa(x_G). \quad (\text{A.56})$$

Offensichtlich ist der Beitrag der optischen Phononen dann gering, wenn das Verhältnis der effektiven Transmissionen und/oder die Funktion $\kappa(x_G)$ klein sind. Der Verlauf von $\kappa(x_G)$ ist in Abb. 4.4 dargestellt. Die Funktion wird für die meisten Zwecke klein, wenn $x_G \geq 6$ ist. Unter der für tiefe Temperaturen gerechtfertigten Annahme $\bar{\Xi}_o \leq \bar{\Xi}_a^j$ folgt schließlich für $x_G = 6$ die Näherung (4.22).

Anhang B.

Ergänzende Berechnungen II

B.1. Verifikation der Lösung des Wärmeleitproblems

Wir wollen hier überprüfen, ob (7.32) tatsächlich unser Problem (7.11) erfüllt. Dazu betrachten wir als Erstes die gegebenen RB, welche aufgrund der Wahl unseres Lösungsansatzes trivial erfüllt sein sollten:

$$\begin{aligned} v(0, t) &= \sum_{n=1}^{\infty} b_n(t) \sin\left(\frac{n\pi}{H} 0\right) e^{-n^2 \frac{t}{t_0}} = 0, \\ v(H, t) &= \sum_{n=1}^{\infty} b_n(t) \sin\left(\frac{n\pi}{H} H\right) e^{-n^2 \frac{t}{t_0}} = 0. \end{aligned}$$

Als Nächstes wollen wir die Gültigkeit der Anfangsbedingung prüfen. Es ist

$$\begin{aligned} v(x, 0) &= \sum_{n=1}^{\infty} b_n(0) \sin\left(\frac{n\pi}{H} x\right) e^{-n^2 \frac{0}{t_0}} = \sum_{n=1}^{\infty} v_n(0) \sin\left(\frac{n\pi}{H} x\right) \\ &= \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2}{H} \int_0^H [\Phi(x') - w(x', 0)] \sin\left(\frac{n\pi}{H} x'\right) dx' \sin\left(\frac{n\pi}{H} x\right) \\ &= \int_0^H [\Phi(x') - w(x', 0)] \frac{2}{H} \sum_{n=1}^{\infty} \sin\left(\frac{n\pi}{H} x'\right) \sin\left(\frac{n\pi}{H} x\right) dx' \\ &= \int_0^H [\Phi(x') - w(x', 0)] \delta(x' - x) dx' \\ &= \Phi(x) - w(x, 0). \end{aligned}$$

Wir haben hier die von uns gefundene Darstellung der Deltafunktion (7.21) ausgenutzt. Schließlich muss $v(x, t)$ noch die partielle DGL in (7.11) lösen. Wir bilden dazu die

zeitliche Ableitung:

$$v_t(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} \dot{b}_n(t) \sin\left(\frac{n\pi}{H}x\right) e^{-n^2 \frac{t}{t_0}} - \sum_{n=1}^{\infty} b_n(t) \sin\left(\frac{n\pi}{H}x\right) \frac{n^2}{t_0} e^{-n^2 \frac{t}{t_0}}. \quad (\text{B.1})$$

Die zweite örtliche Ableitung lautet mit $D(n\pi/H)^2 = n^2/t_0$ sowie $t_0 = H^2/\pi^2 D$

$$Dv_{xx}(x, t) = - \sum_{n=1}^{\infty} b_n(t) \sin\left(\frac{n\pi}{H}x\right) \frac{n^2}{t_0} e^{-n^2 \frac{t}{t_0}} \quad (\text{B.2})$$

$$\Rightarrow v_t(x, t) - Dv_{xx}(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} \dot{b}_n(t) \sin\left(\frac{n\pi}{H}x\right) e^{-n^2 \frac{t}{t_0}}. \quad (\text{B.3})$$

Mit Hilfe der Definition von $b_n(t)$ aus (7.31) können wir die noch verbleibende zeitliche Ableitung leicht berechnen und erhalten

$$\dot{b}_n(t) = \bar{K}_n(t) e^{n^2 \frac{t}{t_0}} = \frac{2}{H} \int_0^H \bar{K}(x', t) \sin\left(\frac{n\pi}{H}x'\right) dx' e^{n^2 \frac{t}{t_0}}. \quad (\text{B.4})$$

Wir haben hierbei die Fourierkoeffizienten (7.14) verwendet. Eingesetzt in (B.3) führt das auf

$$v_t(x, t) - Dv_{xx}(x, t) = \int_0^H \bar{K}(x', t) \frac{2}{H} \sum_{n=1}^{\infty} \sin\left(\frac{n\pi}{H}x'\right) \sin\left(\frac{n\pi}{H}x\right) dx' = \bar{K}(x, t), \quad (\text{B.5})$$

wobei wir hier wieder die Deltafunktion (7.21) benutzen konnten. Hiermit haben wir gezeigt, dass alle Gleichungen aus (7.11) von $v(x, t)$ erfüllt werden.

B.2. Methode der partiellen Integration

Mit Hilfe der partiellen Integration wollen wir nun das Integral auf der rechten Seite von (8.3) nochmals untersuchen. Wir verlangen hier, dass $\tau(t)$ beliebig oft differenzierbar ist¹ und die Funktion selbst sowie ihre Ableitungen auf zumindest stückweise stetigen Integranden führt. Setzen wir $v = \tau(t')$ und $\dot{w} = \exp(n^2 t'/t_0)$, können wir (8.3) partiell

¹Eine Annahme die auch für die Taylorentwicklung von $\tau(t)$ zu treffen ist.

integrieren. Wir erhalten dann

$$\begin{aligned} I(t) &= e^{-n^2 \frac{t}{t_0}} \int_0^t dt' \tau(t') e^{n^2 \frac{t'}{t_0}} \\ &= e^{-n^2 \frac{t}{t_0}} \left(\frac{t_0}{n^2} \left[\tau(t') e^{n^2 \frac{t'}{t_0}} \right]_0^t - \frac{t_0}{n^2} \int_0^t dt' \frac{d\tau(t')}{dt'} e^{n^2 \frac{t'}{t_0}} \right). \end{aligned} \quad (\text{B.6})$$

Das hier auftretende Integral wird nun in analoger Weise erneut partiell integriert:

$$I(t) = e^{-n^2 \frac{t}{t_0}} \left(\frac{t_0}{n^2} \left[\tau(t') e^{n^2 \frac{t'}{t_0}} \right]_0^t - \frac{t_0^2}{n^4} \left[\frac{d\tau(t')}{dt'} e^{n^2 \frac{t'}{t_0}} \right]_0^t + \frac{t_0^2}{n^4} \int_0^t dt' \frac{d^2\tau(t')}{dt'^2} e^{n^2 \frac{t'}{t_0}} \right). \quad (\text{B.7})$$

Da $\tau(t)$ beliebig oft differenzierbar sein soll, können wir die Vorgehensweise immer und immer wieder anwenden, wobei wir wachsende Potenzen am Parameter t_0 beobachten. Das sich ständig wieder neu bildende Integral ergibt eine Funktionenfolge für die wir schreiben können:

$$I_k(t) = e^{-n^2 \frac{t}{t_0}} \frac{t_0^k}{n^{2k}} \int_0^t dt' \frac{d^k \tau(t')}{dt'^k} e^{n^2 \frac{t'}{t_0}}. \quad (\text{B.8})$$

Wenn wir annehmen, dass sich $T(t)$ in der Nähe des Fixpunktes T^* vernünftig verhält, so muss $I(t)$ endlich sein. Hieraus folgt, dass auch $I_k(t)$ endlich ist mit $I_k(t) \rightarrow 0$ für $k \rightarrow \infty$ (Nullfolge). Wir können also diese Entwicklung für ein hinreichend großes k abbrechen, ohne eine allzu große Abweichung vom exakten Wert zu bekommen. Der genäherte Wert von $I(t)$ kann dann geschrieben werden als

$$I(t) \approx e^{-n^2 \frac{t}{t_0}} \left(\frac{1}{n^2} \left[\tau(t) e^{n^2 \frac{t}{t_0}} - \tau(0) \right] t_0 - \frac{1}{n^4} \left[\frac{d\tau(t)}{dt} e^{n^2 \frac{t}{t_0}} - \frac{d\tau(0)}{dt} \right] t_0^2 + \dots \right). \quad (\text{B.9})$$

Betrachten wir nun wieder Zeiten $t \gg t_0$ und berücksichtigen in dieser Entwicklung nur Terme mit $k \leq 3$, so gilt für $I(t)$ näherungsweise

$$I(t) \approx \frac{1}{n^2} \tau(t) t_0 - \frac{1}{n^4} \frac{d\tau(t)}{dt} t_0^2 + \frac{1}{n^6} \frac{d^2\tau(t)}{dt^2} t_0^3. \quad (\text{B.10})$$

Unter den gemachten Voraussetzungen haben wir also ein zur Taylorentwicklung von $\tau(t)$ identisches Ergebnis abgeleitet.

B.3. Analyse von $\tau(t)$

Mit Hilfe eines Euler-Ansatzes $\tau(t) = \exp(kt)$ können wir aus (8.13) die charakteristische Gleichung für k und deren Lösungen $k_{1/2}$ gewinnen:

$$k^2 - \delta k + \omega = 0 \Rightarrow k_{1/2} = \frac{\delta}{2} \pm \sqrt{\frac{\delta^2}{4} - \omega}. \quad (\text{B.11})$$

Um eine Aussage über die Art der Lösungen $k_{1/2}$ und damit über $\tau(t)$ machen zu können, müssen wir die Diskriminante untersuchen. Es sind drei Fälle zu unterscheiden:

1. Es sei $\omega = \delta^2/4$ (aperiodischer Grenzfall): In diesem Fall ist $k_1 = k_2 = \delta/2$ und wir bekommen als Lösung

$$\tau(t) = (A + Bt)e^{\frac{\delta}{2}t}. \quad (\text{B.12})$$

Hier sind die Konstanten A und B noch aus den Anfangsbedingungen zu bestimmen. Um einen stabilen Fixpunkt zu erhalten, sollte $\tau(t)$ in $T^* + \tau(t)$ im Laufe der Zeit verschwinden. Offenbar ist dies mit dieser Bedingung an ω nicht zu realisieren, da $\tau(t)$ für wachsende t exponentiell divergiert und zwar unabhängig von A und B .

2. Es sei $\omega > \delta^2/4$ (Schwingfall): Jetzt sind die $k_{1/2} = (\delta/2) \pm i\sqrt{\omega - (\delta^2/4)} = (\delta/2) \pm i\omega_1$ konjugiert komplexe Zahlen, wodurch wir

$$\tau(t) = (Ae^{i\omega_1 t} + Be^{-i\omega_1 t})e^{\frac{\delta}{2}t} \quad (\text{B.13})$$

bekommen. Diese Lösung beschreibt eine sich selbst erregende Schwingung mit exponentiell wachsender Amplitude. Die zugehörige Bedingung liefert also ebenfalls keinen stabilen Fixpunkt.

3. Es sei $\omega < \delta^2/4$ (aperiodischer Fall): Jetzt sind die $k_{1/2}$ beide reell, wobei $k_1 = (\delta/2) + \sqrt{(\delta^2/4) - \omega} = (\delta/2) + \omega_2 > 0$ und

$$k_2 = \frac{\delta}{2} - \omega_2 = \begin{cases} \geq 0 & \text{für } \delta/2 \geq \omega_2, \\ < 0 & \text{für } \delta/2 < \omega_2. \end{cases} \quad (\text{B.14})$$

Damit ergibt sich für unsere Lösung $\tau(t)^2$ für $t \rightarrow \infty$:

$$\tau(t) = Ae^{(\frac{\delta}{2} + \omega_2)t} + Be^{(\frac{\delta}{2} - \omega_2)t} = \begin{cases} \rightarrow \infty & \text{für } A \neq 0, \\ \rightarrow \infty & \text{für } A = 0 \text{ und } \delta/2 > \omega_2, \\ \rightarrow \tilde{T}^* & \text{für } A = 0 \text{ und } \delta/2 = \omega_2, \\ \rightarrow 0 & \text{für } A = 0 \text{ und } \delta/2 < \omega_2. \end{cases} \quad (\text{B.15})$$

Nur die letzte Relation liefert ein verschwindendes $\tau(t)$ für wachsende Zeiten t und somit einen stabilen Fixpunkt T^* , denn für $A = 0$ und beliebiges $B = \tau_0$ gilt

$$\tau(t) = \tau_0 e^{(\frac{\delta}{2} - \omega_2)t} \rightarrow 0 \text{ für } t \rightarrow \infty, \quad (\text{B.16})$$

wenn $\delta/2 < \omega_2$ ist.

Die obigen Anforderungen an die Konstanten A und B führen auf die im Text genannten speziellen Anfangsbedingungen. Sie sichern, dass unser System sich je nach dem, ob es um τ_0 erwärmt oder abgekühlt wird, sich anschließend wieder entsprechend abkühlt bzw. erwärmt. Ungeachtet der Richtung, zeigt dieser Prozess immer einen exponentiellen Verlauf. Mit dem Wissen, dass es sich bei einem solchen diffusiven System um einen Relaxator handelt, hätten wir auch umgekehrt diese Anfangsbedingungen fordern können.

B.4. Numerische Berechnung der Stromtransmission für Elektronen

Wir wollen hier einen einfachen rekursiven Algorithmus zur numerischen Berechnung der Stromtransmission $\tilde{T}(\hat{\epsilon})$ ableiten. Ausgangspunkt dafür ist die eindimensionale Schrödingergleichung, welche die Wellenfunktion $\psi(y, E_\perp)$ der Elektronen in der y -Richtung bestimmt:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dy^2} + V^{eff}(y) - E_\perp \right] \psi(y, E_\perp) = 0. \quad (\text{B.17})$$

²Da es sich bei $\tau(t)$ um eine kleine Störung der Gleichgewichtstemperatur T^* handeln soll, ist es sinnvoll zu fordern, dass A und B nicht gleichzeitig Null sind.

Hier ist m^* die effektive Masse, $V^{eff}(y)$ das in Abb. 9.1 dargestellte Potenzial und $E_\perp = E - E_x$ die Energie der Elektronenbewegung in y - z -Richtung. Für das effektive Potenzial gilt

$$V^{eff}(y) = \begin{cases} 0 & \text{für } y < 0, \\ V_0 - \frac{V_D}{L}y & \text{für } 0 \leq y \leq L, \\ -V_D & \text{für } y > L. \end{cases} \quad (\text{B.18})$$

Erweitern wir in (B.17) die Energieterme mit V_0 und verwenden $\hat{y} = y/L$, folgt

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{L^2 d\hat{y}^2} + V_0 \frac{\bar{V}^{eff}(\hat{y})}{V_0} - V_0 \frac{E_\perp}{V_0} \right] \bar{\psi}(\hat{y}, E_\perp) = 0. \quad (\text{B.19})$$

Nach Division dieser Gleichung mit V_0 und unter Verwendung von (9.8) sowie $\hat{\epsilon} = (E - E_x)/V_0 = E_\perp/V_0$ und $\beta = 2m^*V_0L^2/\hbar^2$ bleibt (9.7). Zur Lösung dieser Gleichung machen wir den üblichen Ansatz der Streuwellenfunktionen. Eine Streuwelle aus dem Source-Kontakt erfüllt dann die folgende Asymptotik:

$$\hat{\psi}(\hat{y}, \hat{\epsilon}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \begin{cases} e^{i\hat{k}_S(\hat{\epsilon})\hat{y}} + \hat{r}^S(\hat{\epsilon})e^{-i\hat{k}_S(\hat{\epsilon})\hat{y}} & \text{für } \hat{y} < 0, \\ \hat{t}^S(\hat{\epsilon})e^{i\hat{k}_D(\hat{\epsilon})\hat{y}} & \text{für } \hat{y} > 1. \end{cases} \quad (\text{B.20})$$

Dabei sind $\hat{k}_S(\hat{\epsilon}) = \sqrt{\beta\hat{\epsilon}}$ und $\hat{k}_D(\hat{\epsilon}) = \sqrt{\beta(\hat{\epsilon} + \hat{v}_D)}$ die Wellenzahlen im Source- bzw. im Drain-Bereich, was sich durch einsetzen von (B.20) in (9.7) ergibt. Um die Stromtransmission $\tilde{T}(\hat{\epsilon})$ berechnen zu können, müssen wir nach (9.6) den Transmissionskoeffizienten $\hat{t}^S(\hat{\epsilon})$ bestimmen. Zu diesem Zweck diskretisieren wir Gl. (9.7), die wir zuvor noch mit $-\beta$ multiplizieren. Wir zerlegen dazu das Streuintervall $0 \leq \hat{y} \leq 1$ in N Stützstellen mit der Schrittweite von $\Delta = 1/N$. Dann gilt für die diskreten Orte

$$\hat{y} \rightarrow \hat{y}_n := n\Delta \quad \text{mit } \Delta \rightarrow 0 \quad \text{und} \quad -N_S \leq n \leq N + N_D. \quad (\text{B.21})$$

Das Intervall $-N_S \leq n < 0$ entspricht dann dem Source-Bereich, $0 \leq n \leq N$ dem Streubereich und $N < n \leq N + N_D$ dem Drain-Bereich. Wir definieren nun weiter

$$\hat{\psi}(\hat{y}) \rightarrow \hat{\psi}(\hat{y}_n) := \hat{\psi}_n \quad \text{und} \quad \hat{w}(\hat{y}) = \beta[\hat{\epsilon} - \hat{v}(\hat{y})] \rightarrow \hat{w}(\hat{y}_n) := \hat{w}_n. \quad (\text{B.22})$$

Hierin ist das Δ so zu wählen, dass sowohl $\hat{\psi}_n$ als auch \hat{w}_n schwach veränderliche Funktionen von n sind. Unter diesen Umständen ist ein Differentialoperator der Form $d\hat{\psi}(\hat{y})/d\hat{y}$ diskretisierbar durch

$$\frac{d}{d\hat{y}}\hat{\psi}(\hat{y}) \rightarrow \frac{\hat{\psi}_n - \hat{\psi}_{n-1}}{\Delta}. \quad (\text{B.23})$$

Für die zweite Ableitung in (9.7) können wir dann schreiben

$$\frac{d^2}{d\hat{y}^2}\hat{\psi}(\hat{y}) \rightarrow \frac{1}{\Delta} \left[\frac{\hat{\psi}_{n+1} - \hat{\psi}_n}{\Delta} - \frac{\hat{\psi}_n - \hat{\psi}_{n-1}}{\Delta} \right] = \frac{1}{\Delta^2} [\hat{\psi}_{n-1} - 2\hat{\psi}_n + \hat{\psi}_{n+1}]. \quad (\text{B.24})$$

Ersetzen wir nun alle Terme in (9.7) durch ihre diskretisierten Vertreter (B.22) und (B.24), so erhalten wir die eindimensionale diskretisierte Schrödingergleichung

$$\frac{1}{\Delta^2} [\hat{\psi}_{n-1} - 2\hat{\psi}_n + \hat{\psi}_{n+1}] + \hat{w}_n \hat{\psi}_n = 0. \quad (\text{B.25})$$

Die hier auftretenden $\hat{\psi}_n$ können wir nach (B.20) explizit angeben. Durch Multiplikation der Streuwellen mit $\sqrt{2\pi}/\hat{t}^S(\hat{\epsilon})$ folgt:

$$\frac{\sqrt{2\pi}}{\hat{t}^S(\hat{\epsilon})} \hat{\psi}_n := \hat{\phi}_n = \begin{cases} \frac{1}{\hat{t}^S(\hat{\epsilon})} e^{i\hat{k}_S(\hat{\epsilon})(n/N)} + \frac{\hat{r}^S(\hat{\epsilon})}{\hat{t}^S(\hat{\epsilon})} e^{-i\hat{k}_S(\hat{\epsilon})(n/N)} & \text{für } n < 0, \\ e^{i\hat{k}_D(\hat{\epsilon})(n/N)} & \text{für } n > N. \end{cases} \quad (\text{B.26})$$

Multiplizieren wir nun auch (B.25) mit $\sqrt{2\pi}/\hat{t}^S(\hat{\epsilon})$, lässt sie sich in der nachstehenden Form aufschreiben

$$\hat{\phi}_{n-1} = -\hat{\phi}_{n+1} + (2 - \Delta^2 \hat{w}_n) \hat{\phi}_n. \quad (\text{B.27})$$

Aus (B.26) folgen dann direkt zwei Anfangswerte mit

$$\hat{\phi}_{N+1} = e^{-i\hat{k}_S(\hat{\epsilon})[1+(1/N)]} \quad \text{und} \quad \hat{\phi}_{N+2} = e^{-i\hat{k}_S(\hat{\epsilon})[1+(2/N)]}. \quad (\text{B.28})$$

Ausgehend von diesen Startwerten lassen sich dann alle $\hat{\phi}_n$ aus (B.27) rekursiv berechnen. Insbesondere erhalten wir

$$\hat{\phi}_{-1} = \frac{1}{\hat{t}^S(\hat{\epsilon})} e^{-i\hat{k}_S(\hat{\epsilon})(1/N)} + \frac{\hat{r}^S(\hat{\epsilon})}{\hat{t}^S(\hat{\epsilon})} e^{i\hat{k}_S(\hat{\epsilon})(1/N)} \quad (\text{B.29})$$

und

$$\hat{\phi}_{-2} = \frac{1}{\hat{t}^S(\hat{\epsilon})} e^{-i\hat{k}_S(\hat{\epsilon})(2/N)} + \frac{\hat{r}^S(\hat{\epsilon})}{\hat{t}^S(\hat{\epsilon})} e^{i\hat{k}_S(\hat{\epsilon})(2/N)}. \quad (\text{B.30})$$

Aus den zwei linearen Gln. (B.29) und (B.30) können wir nun für jede Energie $\hat{\epsilon}$ die beiden Gesuchten

$$\hat{t}^S(\hat{\epsilon}) = \frac{1 - e^{-2i\hat{k}_S(\hat{\epsilon})(1/N)}}{\hat{\phi}_{-1} e^{i\hat{k}_S(\hat{\epsilon})(1/N)} - \hat{\phi}_{-2}} \quad (\text{B.31})$$

und $\hat{r}^S(\hat{\epsilon})$ ausrechnen. Schließlich folgen damit die Stromtransmission nach (9.6) sowie die Streufunktionen im gesamten Ortsbereich, indem wir für sie fordern

$$\hat{\psi}_n = \frac{\hat{t}^S(\hat{\epsilon})}{\sqrt{2\pi}} \hat{\phi}_n. \quad (\text{B.32})$$

Auf analoge Weise können die vom Drain-Bereich einfallenden Streuzustände bestimmt werden.

Literaturverzeichnis

- [1] NOLTING, W.: *Grundkurs Theoretische Physik 4: Spezielle Relativitätstheorie, Thermodynamik*. Springer, 2005
- [2] FRANZ, R. ; WIEDEMANN, G.: Ueber die Wärme-Leitungsfähigkeit der Metalle. In: *Annalen der Physik* 165 (1853), Nr. 8, S. 497–531
- [3] LORENZ, L.: Bestimmung der Wärmegrade in absolutem Maasse. In: *Annalen der Physik* 223 (1872), Nr. 11, S. 429–452
- [4] ASHCROFT, N. ; MERMIN, N.: *Solid State Physics*. Saunders College Publishers, 1976
- [5] KITTEL, C.: *Introduction to Solid State Physics*. WILEY, 2005
- [6] CZYCHOLL, G.: *Theoretische Festkörperphysik*. Springer, 2008
- [7] DZIUK, G.: *Theorie und Numerik partieller Differentialgleichungen*. Walter de Gruyter, 2010
- [8] CHANG, C. W. ; OKAWA, D. ; MAJUMDAR, A. ; ZETTL, A.: Solid-State Thermal Rectifier. In: *Science* 314 (2006), S. 1121
- [9] LI, B. ; WANG, L. ; CASATI, G.: Negative differential thermal resistance and thermal transistor. In: *Appl. Phys. Lett.* 88 (2006), S. 143501
- [10] WANG, L. ; LI, B.: Thermal Logic Gates: Computation with Phonons. In: *Phys. Rev. Lett.* 99 (2007), S. 177208
- [11] WANG, L. ; LI, B.: Thermal Memory: A Storage of Phononic Information. In: *Phys. Rev. Lett.* 101 (2008), S. 267203

- [12] ZHANG, W. ; MINGO, N. ; FISHER, T.: The Atomistic Green's Function Method: An Efficient Simulation Approach for Nanoscale Phonon Transport. In: *Numerical Heat Transfer B* 51 (2007), Nr. 3, S. 333–349
- [13] REGO, L. G. C.: Thermal Transport in the Quantum Regime. In: *Physica Status Solidi A* 187 (2001), Nr. 1, S. 239–251
- [14] ROMANO, G. ; PECCHIA, A. ; CARLO, A. D.: Coupling of Molecular Vibrons with Contact Phonon Reservoirs. In: *J. Phys.: Condens. Matter* 19 (2007), S. 215207
- [15] FREDERIKSEN, T. ; PAULSSON, M. ; BRANDBYGE, M. ; JAUHO, A.-P.: Inelastic transport theory from first principles: Methodology and application to nanoscale devices. In: *Phys. Rev. B* 75 (2007), S. 205413
- [16] YAMAMOTO, T. ; NAKAZAWA, Y. ; WATANABE, K.: Control of electron- and phonon-derived thermal conductances in carbon nanotubes. In: *New J. Phys.* 9 (2007), S. 245
- [17] ANGELESCU, D. ; CROSS, M. ; ROUKES, M.: Heat Transport in Mesoscopic Systems. In: *Superlattices Microstruct.* 23 (1998), S. 673
- [18] MAZUMDAR, S. ; MAJUMDAR, A.: Monte Carlo Study of Phonon Transport in Solid Thin Films including Dispersion and Polarization. In: *Journal of Heat Transfer* 123 (2001), S. 749
- [19] SRINIVASAN, S. ; MILLER, R. ; MAROTTA, E.: Paralell Computation of the Boltzmann Transport Equation for Microscale Heat Transfer in Multilayered Thin Films. In: *Numerical Heat Transfer B* 46 (2004), S. 31–58
- [20] DATTA, S.: *Electronic Transport in Mesoscopic Systems*. Cambridge University Press, 1995
- [21] LI, W.-X. ; CHEN, K.-Q. ; DUAN, W. ; WU, J. ; GU, B.-L.: Phonon Transport and Thermal Conductivity in Dielectric Quantum Wire. In: *J. Phys. D: Appl. Phys.* 36 (2003), S. 3027
- [22] HUANG, W.-Q. ; CHEN, K.-Q. ; SHUAI, Z. ; WANG, L. ; HU, W.: Discontinuity Effect on the Phonon Transmission and Termal Conductance in a Dielectric Quantum Waveguide. In: *Phys. Lett. A* 336 (2005), S. 245

-
- [23] CHEN, K.-Q. ; LI, W.-X. ; DUAN, W. ; SHUAI, Z. ; GU, B.-L.: Effect of defects on the thermal conductivity in a nanowire. In: *Phys. Rev. B* 72 (2005), S. 045422
- [24] ARIAS, T. A. ; PAYNE, M. C. ; JOANNOPOULOS, J. D.: Ab initio molecular dynamics: Analytically continued energy functionals and insights into iterative solutions. In: *Phys. Rev. Lett.* 69 (1992), Nr. 7, S. 1077–1080
- [25] POULIKAKOS, D. ; ARCIDIACONO, S. ; MARUYAMA, S.: Molecular Dynamics Simulation in Nanoscale Heat Transfer: A Review. In: *Microscale Thermophys. Eng.* 7 (2003), S. 181
- [26] ZHONG, Z. ; WANG, X. ; XU, J.: Equilibrium Molecular Dynamics Study of Phonon Thermal Transport in Nanomaterials. In: *Numerical Heat Transfer B* 46 (2004), S. 429–446
- [27] SAMVEDI, V. ; TOMAR, V.: The role of interface thermal boundary resistance in the overall thermal conductivity of Si-Ge multilayered structures. In: *Nanotechnology* 20 (2009), S. 365701
- [28] GREINER, A. ; REGGIANI, L. ; KUHN, T. ; VARANI, L.: Thermal Conductivity and Lorenz Number for One-Dimensional Ballistic Transport. In: *Phys. Rev. Lett.* 78 (1997), Nr. 6, S. 1114–1117
- [29] VENKATESH, R. ; AMRIT, J. ; CHALOPIN, Y. ; VOLZ, S.: Thermal Resistance of Metal Nanowire Junctions in the Ballistic Regime. In: *Phys. Rev. B* 83 (2011), Nr. 11, S. 115425
- [30] REGO, L. G. C. ; KIRCZENOW, G.: Quantized Thermal Conduction of Dielectric Quantum Wires. In: *Phys. Rev. Lett.* 81 (1998), Nr. 1, S. 232–235
- [31] GREINER, A. ; REGGIANI, L. ; KUHN, T.: Comment on 'Quantized Thermal Conductance of Dielectric Quantum Wires'. In: *Phys. Rev. Lett.* 81 (1998), Nr. 22, S. 5037
- [32] BULDUM, A. ; CIRACI, S. ; FONG, C. Y.: Quantum Heat Transfer Through an Atomic Wire. In: *J. Phys.: Condens. Matter.* 12 (2000), Nr. 14, S. 3349–3358

-
- [33] ZIMMERMANN, J. ; PAVONE, P. ; CUNIBERTI, G.: Vibrational Modes and Low-Temperature Thermal Properties of Graphene and Carbon Nanotubes: A Minimal Force-Constant Model. In: *Phys. Rev. B* 78 (2008), S. 045410
- [34] HOPKINS, P. E. ; NORRIS, P. M. ; TSEGAYE, M. S. ; GHOSH, A. W.: Extracting Phonon Thermal Conductance Across Nanoscale Junctions: Nonequilibrium Green's Function Approach Compared to Semiclassical Methods. In: *J. Appl. Phys.* 106 (2009), S. 063503
- [35] REGO, L. G. C. ; KIRCZENOW, G.: Fractional exclusion statistics and the universal quantum of thermal conductance: A unifying approach. In: *Phys. Rev. B* 59 (1999), S. 13080–13086
- [36] KRIVE, I. V. ; MUCCIOLO, E. R.: Transport properties of quasiparticles with fractional exclusion statistics. In: *Phys. Rev. B* 60 (1999), S. 1429–1432
- [37] SCHWAB, K. ; HENRIKSEN, E. A. ; WORLOCK, J. M. ; ROUKES, M. L.: Measurement of the Quantum of Thermal Conductance. In: *Nature* 404 (2000), S. 974–976
- [38] YANG, P. ; SUN, Q. F. ; GUO, H. ; HU, B.: Thermal transport in a dielectric T-shaped quantum wire. In: *Phys. Rev. B* 75 (2007), S. 235319
- [39] XIE, F. ; CHEN, K.-Q. ; WANG, Y. G. ; ZHANG, Y.: Effect of the evanescent modes on ballistic thermal transport in quantum structures. In: *J. Appl. Phys.* 103 (2008), S. 084501
- [40] SANTAMORE, D. H. ; CROSS, M. C.: Effect of Phonon Scattering by Surface Roughness on the Universal Thermal Conductance. In: *Phys. Rev. Lett.* 87 (2001), Nr. 11, S. 115502
- [41] ZHANG, L. ; KEBLINSKI, P. ; WANG, J.-S. ; LI, B.: Interfacial thermal transport in atomic junctions. In: *Phys. Rev. B* 83 (2011), S. 064303
- [42] LI, H. ; AGARWALLA, B. K. ; WANG, J.-S.: Generalized Caroli formula for the transmission coefficient with lead-lead coupling. In: *Phys. Rev. E* 86 (2012), S. 011141

-
- [43] TONG, P. ; LI, B. ; HU, B.: Wave transmission, phonon localization, and heat conduction of a one-dimensional Frenkel-Kontorova chain. In: *Phys. Rev. B* 59 (1999), Nr. 13, S. 8639
- [44] MA, S. ; XU, H. ; DENG, H. ; YANG, B.: Phonon transmission and thermal conductance in one-dimensional system with on-site potential disorder. In: *Physics Letters A* 375 (2011), S. 1831–1838
- [45] SEGAL, D. ; NITZANA, A. ; HÄNGGI, P.: Thermal conductance through molecular wires. In: *J. Chem. Phys.* 119 (2003), S. 6840
- [46] MINGO, N. ; YANG, L.: Phonon Transport in Nanowires Coated with an Amorphous Material: An Atomistic Green's Function Approach. In: *Phys. Rev. B* 68 (2003), S. 245406
- [47] ZHANG, W. ; MINGO, N. ; FISHER, T.: Simulation of Interfacial Phonon Transport in Si-Ge Heterostructures Using an Atomistic Green's Function Method. In: *Journal of Heat Transfer* 129 (2007), S. 483–491
- [48] DATTA, S.: Nanoscale Device modeling: the Green's Function Method. In: *Superlattices Microstruct.* 28 (2000), Nr. 4, S. 253–278
- [49] DATTA, S.: *Quantum Transport: Atom to Transistor*. Cambridge University Press, 2005
- [50] LANDAUER, R.: Electrical Resistance of Disordered One-Dimensional Lattices. In: *Philos. Mag.* 21 (1970), S. 863–867
- [51] LANGRETH, D. C. ; ABRAHAMS, E.: Derivation of the Landauer Conductance Formula. In: *Phys. Rev. B* 24 (1981), Nr. 6, S. 2978–2984
- [52] BLENCOWE, M. P.: Quantum energy flow in mesoscopic dielectric structures. In: *Phys. Rev. B* 59 (1999), Nr. 7, S. 4992–4998
- [53] DOVE, M. T.: *Introduction to Lattice Dynamics*. Cambridge University Press, 1993
- [54] TURNEY, J. E. ; LANDRY, E. S. ; MCGAUGHEY, A. J. H. ; AMON, C. H.: Predicting phonon properties and thermal conductivity from anharmonic lattice dynamics

- calculations and molecular dynamics simulations. In: *Phys. Rev. B* 79 (2009), S. 064301
- [55] TURNEY, J. E. ; MCGAUGHEY, A. J. H. ; AMON., C. H.: Assessing the applicability of quantum corrections to classical thermal conductivity predictions. In: *Phys. Rev. B* 79 (2009), S. 224305
- [56] NOLTING, W.: *Grundkurs Theoretische Physik 5/1*. Springer, 2004
- [57] FOX, M.: *Optische Eigenschaften von Festkörpern*. Oldenbourg Verlag, 2012
- [58] ECONOMOU, E. N.: *Green's Functions in Quantum Physics*. Springer, 1990
- [59] HUNKLINGER, S.: *Festkörperphysik*. Oldenbourg, 2009
- [60] KÄSO, M. ; WULF, U.: Quantized thermal conductance via phononic heat transport in nanoscale devices at low temperatures. In: *Phys. Rev. B* 89 (2014), S. 134309
- [61] WANG, J.-S. ; WANG, J. ; LÜ, J. T.: Quantum thermal transport in nanostructures. In: *Eur. Phys. J. B* 62 (2008), S. 381–404
- [62] LITTLE, W. A.: The Transport of Heat between Dissimilar Solids at Low Temperatures. In: *Can. J. Phys.* 37 (1959), S. 334
- [63] OZPINECI, A. ; CIRACI, S.: Quantum Effects of Thermal Conductance Through Atomic Chains. In: *Phys. Rev. B* 63 (2001), Nr. 12, S. 125415
- [64] MADELUNG, O.: *Festkörpertheorie I*. Springer, 1988
- [65] KOPITZKI, K.: *Einführung in die Festkörperphysik*. Teubner, 1989
- [66] TSAO, J. Y.: *Materials Fundamentals of Molecular Beam Epitaxy*. Academic Press, 2012
- [67] ZHOU, L.-P. ; WANG, M.-P. ; ZHU, J.-J. ; PENG, X.-F. ; CHEN, K.-Q.: Effects of dimensionality on the ballistic phonon transport and thermal conductance in nanoscale structures. In: *J. Appl. Phys.* 105 (2009), S. 114318

- [68] TORRES-TORRES, C. ; LÓPEZ-SUÁREZ, A. ; TORRES-MARTÍNEZ, R. ; RODRIGUEZ, A. ; REYES-ESQUEDA, J. A. ; CASTAÑEDA, L. ; ALONSO, J. C. ; OLIVER, A.: Modulation of the propagation speed of mechanical waves in silicon quantum dots embedded in a silicon-nitride film. In: *Optics Express* 20 (2012), Nr. 4, S. 4784–4789
- [69] BORKJE, K. ; GIRVIN, S. M.: Quantum optomechanics with a high-frequency dilational mode in thin dielectric membranes. In: *New J. Phys.* 14 (2012), S. 085016
- [70] THACHER, P. D.: Effect of Boundaries and Isotopes on the Thermal Conductivity of LiF. In: *Phys. Rev.* 156 (1967), S. 975
- [71] INYUSHKIN, A. V. ; TALDENKOV, A. N. ; GIBIN, A. M. ; GUSEV, A. V. ; POHL, H.-J.: On the isotope effect in thermal conductivity of silicon. In: *Phys. Stat. Sol. C* 1 (2004), Nr. 11, S. 2995–2998
- [72] BLAKEMORE, J. S.: Semiconducting and other major properties of gallium arsenide. In: *J. Appl. Phys.* 53 (1982), S. R123–R181
- [73] COTTAM, R. I. ; SAUNDERS, G. A.: The elastic constants of GaAs from 2 K to 320 K. In: *J. Phys. C* 6 (1973), S. 2105–2118
- [74] KRIEGER, M. ; SIGG, H. ; HERRES, N. ; BACHEM, K. ; KÖHLER, K.: Elastic constants and Poisson ratio in the system AlAs–GaAs. In: *Appl. Phys. Lett.* 66 (1995), S. 682
- [75] BURENKOV, Yu. A. ; BURDUKOV, Yu. M. ; DAVIDOV, S. Y. ; NIKANOROV, S. P.: Temperature dependences of the elastic constants of galliumarsenide. In: *Sov. Phys. Solid State* 15 (1973), Nr. 6, S. 1175–1177
- [76] KÄSO, M. ; WULF, U. ; KUČERA, J. ; RICHTER, H. ; HÖNTSCHEL, J.: Thermal properties of quantum devices in integrated circuits embedded in a chip environment. In: *Phys. Stat. Sol. C* 11 (2014), Nr. 1, S. 105–108
- [77] POPESCU, C.: The thermal runaway mechanism of second breakdown phenomenon. In: *Solid-State Electronics* 13 (1970), Nr. 6, S. 887–901
- [78] RINALDI, N. ; D’ALESSANDRO, V.: Theory of electrothermal behavior of bipolar transistors: Part I – Single-finger devices. In: *IEEE Transactions on Electron Devices* 52 (2005), Sep., Nr. 9, S. 2009–2021

- [79] RINALDI, N. ; D'ALESSANDRO, V.: Theory of electrothermal behavior of bipolar transistors: Part II – Two-finger devices. In: *IEEE Transactions on Electron Devices* 52 (2005), Sep., Nr. 9, S. 2022–2032
- [80] SEMENOV, O. ; VASSIGHI, A. ; SACHDEV, M.: Impact of self-heating effect on long-term reliability and performance degradation in CMOS circuits. In: *IEEE Trans. on Devices and Materials Reliability* 6 (2006), Mar., Nr. 1, S. 17–27
- [81] JÄCKLE, J.: *Einführung in die Transporttheorie*. Vieweg, 1978
- [82] YU, B. ; WANG, H. ; JOSHI, A. ; XIANG, Q. ; IBOK, E. ; LIN, M.-R.: 15 nm Gate Length Planar CMOS Transistor. In: *IEDM Tech. Dig.* (2001), Dec., S. 937–939
- [83] DORIS, B. ; IEONG, M. ; KANARSKY, T. ; ZHANG, Y. ; ROY, R. A. ; DOKUMACI, O. ; REN, Z. ; JAMIN, F.-F. ; SHI, L. ; NATZLE, W. ; HUANG, H.-J. ; MEZZAPELLE, J. ; MOCUTA, A. ; WOMACK, S. ; GRIBELYUK, M. ; JONES, E. C. ; MILLER, R. J. ; WONG, H. S. P. ; HAENSCH, W.: Extreme scaling with ultra-thin Si channel MOSFETs. In: *IEDM Tech. Dig.* (2002), Dec., S. 267–279
- [84] DOYLE, B. ; ARGHAVANI, R. ; BARLAGE, D. ; DATTA, S. ; DOCZY, M. ; KAVALIEROS, J. ; MURTHY, A. ; CHAU, R.: Transistor Elements for 30 nm Physical Gate Lengths. In: *Intel Technol. J.* 6 (2002), May, Nr. 2, S. 42–54
- [85] CHAU, R. ; DOYLE, B. ; DOCZY, M. ; DATTA, S. ; HARELAND, S. ; JIN, B. ; KAVALIEROS, J. ; METZ, M.: Silicon Nano-Transistors and Breaking the 10 nm Physical Gate Length Barrier. In: *61st Device Research Conference* (2003), Jun., S. 123–126
- [86] FUKUTOME, H. ; HOSAKA, K. ; KAWAMURA, K. ; OHTA, H. ; UCHINO, Y. ; AKIYAMA, S. ; AOYAMA, T.: Sub-30-nm FUSI CMOS Transistors Fabricated by Simple Method Without Additional CMP Process. In: *IEEE Electron Dev. Lett.* 29 (2008), Jul., Nr. 7, S. 765–767
- [87] BEDELL, S. W. ; MAJUMDAR, A. ; OTT, J. A. ; ARNOLD, J. ; FOGEL, K. ; KOESTER, S. J. ; SADANA, D. K.: Mobility Scaling in Short-Channel Length Strained Ge-on-Insulator P-MOSFETs. In: *IEEE Electron Dev. Lett.* 29 (2008), Jul., Nr. 7, S. 811–813

-
- [88] NEMNES, G. A. ; WULF, U. ; RACEC, P. N.: Nano-transistors in the Landauer-Büttiker formalism. In: *J. Appl. Phys.* 96 (2004), Nr. 1, S. 596–604
- [89] NEMNES, G. A. ; WULF, U. ; RACEC, P. N.: Nonlinear I-V characteristics of nanotransistors in the Landauer-Büttiker formalism. In: *J. Appl. Phys.* 98 (2005), Nr. 8, S. 084308
- [90] WULF, U. ; KRAHLISCH, M. ; RICHTER, H.: Scaling properties of ballistic nano-transistors. In: *Nanoscale Research Letters* 6 (2011), Apr., S. 365
- [91] WULF, U. ; RICHTER, H.: Scale-Invariant Drain Current in Nano-FETs. In: *Journal of Nano Research* 10 (2010), Apr., S. 49–61
- [92] WULF, U. ; RICHTER, H.: Scaling in quantum transport in silicon nano-transistors. In: *Solid State Phenomena* 156–158 (2010), S. 517–521
- [93] WULF, U. ; KRAHLISCH, M. ; KUČERA, J. ; RICHTER, H. ; HÖNTSCHEL, J.: A Quantitative Model For Quantum Transport in Nano-Transistors. In: *Nanosystems: Physics, Chemistry, Mathematics* 4 (2013), Nr. 6, S. 800–809
- [94] MARGENAU, H. ; MURPHY, G. M.: *The Mathematics of Physics and Chemistry*. Van Nostrand, 1956
- [95] POPESCU, C.: Selfheating and thermal runaway phenomena in semiconductor devices. In: *Solid-State Electronics* 13 (1970), Nr. 4, S. 441–450
- [96] GOVER, M. J. C.: The Eigenproblem of a Tridiagonal 2-Toeplitz Matrix. In: *Linear Algebra Appl.* 197/198 (1994), S. 63–78

Danksagung

So eine Arbeit wird eigentlich nie fertig, man muß sie für fertig erklären, wenn man nach Zeit und Umständen das mögliche getan hat (Johann Wolfgang von Goethe, Italienische Reise, 1787). Damit ist also auch für mich die Zeit gekommen, mich bei all denjenigen Menschen zu bedanken, die zur Entstehung dieser Arbeit besonders beigetragen haben.

Aller größter Dank und Respekt gehört meinen Doktorvater Herrn Dr. Ulrich Wulf. Er begleitet mich auf nahezu meinem gesamten Weg - vom Studenten bis zum Physiker - und prägte meine akademische Entwicklung wie kein Zweiter. In den vielen Stunden anregender Diskussion, welche oft über das übliche Maß hinausgingen, eröffnete er mir eine Vielzahl nicht nur fachlicher Einblicke. Ich danke natürlich auch Herrn Prof. Dr. Götz Seibold sowie allen Kolleginnen und Kollegen der Nachwuchsforschergruppe "Hybride Systeme", die für mich das nötige Umfeld schufen, welches von enormen Wert für das Gelingen einer solchen Arbeit ist und die mir immer offen und hilfsbereit gegenüberstanden. Mit meinem Wechsel in ein neues Tätigkeitsfeld, gebührt auch Herrn Prof. Dr. Felix Müsgens großer Dank. Neben hilfreichen Ratschlägen, ermöglichte er mir vor allem die Fertigstellung dieser Arbeit, indem er mir wichtige Freiräume verschaffte. Ohne diese Zuwendung wäre mir die Beendigung dieser Arbeit ungleich schwerer gefallen. Ich danke ebenfalls Herrn Prof. Dr. Hans Richter sowie Herrn Prof. Dr. Tilmann Kuhn, die sich trotz zahlreicher Verpflichtungen die Zeit für die Begutachtung meiner Dissertation genommen haben.

Besonders dankbar bin ich meiner Familie - allen voran meiner lieben Frau Manuela - die mir sowohl unterstützend, als auch motivierend in jeder Phase dieser Arbeit zur Seite standen. Sie haben mich vor vielerlei Ablenkung bewahrt und zu jeder Zeit, vor allem am zehrenden Ende dieser Arbeit, so manche Entbehrung wie selbstverständlich hin genommen.